ボーズ・アインシュタイン凝縮の世界

上田正仁

東京工業大学

Contents

1. はじめに

1995年に液体ヘリウム以外ではじめての中性原子のボース・アインシュタイン凝縮（BEC)[1]が気体相で実現されて以来、これまでに10種類の中性原子気体のBECが実現された。新しい原子種や分子を冷却するさまざまな試みも行われており、BECとなる原子種は今後も増加するものと期待される。

BECの研究は、1924年にアインシュタインが理想同種粒子系の温度を下げていくと、ある温度以下で凝縮相と飽和蒸気相が共存することを指摘したことに始まる。粒子間に引力相互作用が存在する場合には、このような現象は古典的なボルツマン気体でも起こる。アインシュタインは、同種粒子が原理的に識別できないという量子力学特有の性質のために、粒子間に直接的な引力が存在しなくてもそのような凝縮が起こりうることを指摘した。アインシュタインはこれを「引力なしの凝縮」と呼んだ。この当時は、ボース統計とフェルミ統計の区別が認識されていなかったことを考えると（パウリの排他原理の発見は1925年)、アインシュタインの洞察力の底知れない深さが感じられる。

BECが生じる起源は、同種粒子の識別不可能性のために多粒子系のとりうる状態数が粒子数が増加すると指数関数的に減少することにある。その結果、たとえ粒子数がマクロであっても、十分低温では系のとりうる状態が極端に制限され、このため量子力学的振る舞いがマクロに認識される状況が生じる。古典的には存在しないこのような量子多体系の性質がいかにわかりづらいかということは、液体ヘリウム超流動の本質がBECであることを認識するために四半世紀、超伝導の本質が電子対のBECであることが認識されるのに半世紀かかったという事実からも推察できる。

1995年に実現された原子気体のBECの意義は、その制御性の高さとそれがもたらした、また、今後ももたらすであろうと期待されている新現象の発見と応用の可能性である。冷却原子気体は原子数、温度、相互作用の強さ、次元、系を閉じ込めるポテンシャル形状などほとんどすべての物質パラメーターおよび外部変数を自在に変化させることができる究極の量子物質である。この系を用いることにより量子多体系を制御された理想的な状況下で研究する道が開かれた。以下では、ボース・アインシュタイン凝縮の基礎を振り返り、その多様な物理の中から引力相互作用をするボース・アインシュタイン凝縮に関するこれまでの研究で得られた知見について述べる。

2. 量子論の本質

自然の驚くべき多様性と普遍性が、ファンダメンタルな物理法則からどのように現れるか？ミクロからマクロへと至る道筋は決して平坦ではなく、さまざまな階層構造が存在し各階層はそれぞれ独自の法則に従っている。計算機の能力が向上すれば、多粒子系のシュレーディンガー方程式を解くだけですべての現象が理解できるという考えには、おそらく致命的な落とし穴が存在してる。多くの場合、現象を理解する出発点は、それを記述する平均場を発見しその安定性や励起スペクトルを分析することである。平均場は、秩序パラメーターと言い換えてもよい。ボース・アインシュタイン凝縮は、超流動や超伝導を引き起こす基本的なメカニズムであり、それと同時にこれらの状態を記述する秩序パラメーターをも生み出す。

巨視的量子現象を考える前にまず、1体の量子力学の復習からはじめよう[1]。量子論の本質は、「粒子と波動の二重性」にあると言われるが、これは次のことを意味する。自由粒子は、運動量 $\vec{p}$ とエネルギー E によって特徴づけられる。他方、自由な波である平面波は波数ベクトル $\vec{k}$ と周波数 ω によって記述される。粒子と波動の二重性は両者を記述

[1] 以下の記述のより詳しい議論は次の本を参照。上田正仁「現代量子物理学　基礎と応用」（培風館）

する物理量の組 $(\vec{p}, E)$ と $(\vec{k}, \omega)$ が同じ情報を持つということを意味する。すなわち、両者は共通の普遍定数—プランク定数 $\hbar$ —で結ばれている。

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}, \quad E = \hbar\omega \tag{1}$$

(1) は、アインシュタイン–ドブロイの関係式と呼ばれる。量子論は $(\vec{p}, E)$ の物理量の組で記述される粒子像と $(\vec{k}, \omega)$ の物理量の組で記述される波動像をアインシュタイン–ドブロイの関係式を通じで統一する理論である。

自由な波である平面波は $\Psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}$ と表される。アインシュタイン–ドブロイの関係式 (1) より

$$p\Psi = \hbar k \Psi = \hbar k e^{i(kx-\omega t)} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} e^{i(kx-\omega t)} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi \tag{2}$$

$$E\Psi = \hbar\omega\Psi = \hbar\omega e^{i(kx-\omega t)} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} e^{i(kx-\omega t)} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi \tag{3}$$

が得られる。これらの結果は、粒子の性質を波の描像で記述しようとすると、運動量やエネルギーといった物理量が微分演算子で表されることを示している。

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{4}$$

古典力学は、このような置き換えを行うことによって量子力学へと移行できる。これを量子化の手続という。例えば、ポテンシャル $V(x)$ 中の質量 m の粒子のエネルギーは

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{5}$$

で与えられる。これに量子化の手続を施すと、シュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\Psi(x,t) \tag{6}$$

が得られる。$\Psi(x,t)$ は系の状態を記述する波動関数である。

粒子—波動二重性は波動関数を解釈する上でも本質的な役割を果たす。量子論における粒子性とは、分割不可能性を意味する。具体例でいうと、箱の中に電子が一個あるとして箱を二つに仕切ってそのどちらに電子がいるかを観測すると、たとえ観測前の電子の波動関数が箱全体に広がっていたとしても、電子は箱のどちらか一方にのみ観測されるという経験事実を指す。従って、Ψ を任意に分割できる連続体としての波（これは実在の波とも呼ばれる）を記述するものと解釈することはできない。Ψ は確率振幅という情報を記述する量であると解釈せざるを得ない。このように量子論は、古典論では異質であった粒子描像と波動描像を統一する代償として、素朴実在論の放棄を我々に要求する。このことは、量子論の適用範囲をマクロな世界へと外挿しようとする際には、シュレーディンガーの猫に代表される我々の日常感覚と鋭く対立するパラドックスを生む。他方、実在が情報そのものであることを主張する量子論は情報理論とシンデレラとその靴のように相性がよい。量子情報の分野で仕事をしている新世代には、ここに述べたような違和感は—量子論が内部矛盾をいまだ露呈していない以上、多世界論者と同様に—もともと存在しないのかもしれない。

ある現象が量子的か古典的かを判定するひとつの基準は、$\hbar \to 0$ の極限での振る舞いと比較することである。このとき、光は波になり、電子は粒子となるので、光が粒子性を

示せばそれは量子的であり、また、電子が干渉効果を示せばそれは量子的であるといえる。しかし、現実には、$\hbar$ はゼロではないので、光も電子も粒子性と波動性を示す。すなわち、一体の範囲内では両者に本質的な差はなく、それぞれ対応する現象が存在する。たとえば、波動現象を例にとると、

光	電子
ヤングの干渉	ヤングの干渉、アハラノフ・ボーム効果
後方散乱の増大	アンダーソン局在
スペックルパターン	コンダクタンスの普遍的揺らぎ

のような対応関係がある。このうち、光に対応する現象は、$\hbar \to 0$ なる極限をとっても残るが、電子に対する現象は、古典的なボルツマン輸送理論に対する $\hbar/E_{\mathrm{F}}\tau$ (E_{F} はフェルミエネルギー、τ は電子の散乱時間) のオーダーの量子補正として現れる。繰り返しになるが、一体の範囲で考える限り、光と電子の差はない。両者の差は、複数の粒子が同時に存在する場合に現れる。これを次に議論しよう。

3. 同種粒子の識別不可能性の原理

巨視的な量子効果が発現する上で致命的な役割をするのは、同種粒子の識別不可能性の原理である。この原理の意味を理解するために、系のとりうる状態として２つの箱を考え、これに２個の粒子を分配する場合の数を考えよう。古典論では、たとえ２個の粒子が同種粒子であってもラベルをつけて識別することができる。その理由は、古典論では粒子の位置と運動量を同時に測定できるのでその軌道を時々刻々追跡することが原理的には可能だからである。従って、粒子のつめ方は、(1) 箱１に２粒子、(2) 箱２に２粒子、(3) 箱１に粒子 A、箱２に粒子 B、(4) 箱１に粒子 B、箱２に粒子 A を詰める４通りある。それぞれの場合が同じ確率で起こるものと仮定すると、箱１に両方の粒子が見出される確率は 1/4 となる。

量子論では、不確定性関係のために、点粒子 (point particle) の軌道というものを考えることができず、同種粒子を識別することが原理的にできない。従って、ボース粒子の場合は、箱１に両方の粒子が見出される確率は（上記の (3) と (4) は、同じ状態とみなされるので）1/3 に増加する。他方、フェルミ粒子の場合、この確率は 0 に減少する。このように、古典粒子に比べてボース粒子はお互いに集まろうとする傾向があり、フェルミ粒子は、避けようとする傾向がある。注目すべき事は、このような傾向が粒子間の相互作用のために起こったわけではなく、量子統計性のおかげで起こったことである。

同種粒子系がとりうる状態の数が古典論の場合に比べて少なくなるという事実は、数学的には粒子を識別するラベル（位置、運動量、等）に関して波動関数を対称化（あるいは反対称）しなければならないという要請に現れる。簡単のために２粒子系を考え、その状態を特徴づけるラベルを ξ_1、ξ_2 としよう。シュレーディンガー方程式を解いて波動関数 $\Psi_{12}(\xi_1,\xi_2)$ が得られたとすると、全系の波動関数は

$$\Psi(\xi_1,\xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_{12}(\xi_1,\xi_2) \pm \Psi_{12}(\xi_2,\xi_1)]$$

のように（反）対称化される。ここで、ボース統計の場合はプラス符号、フェルミ統計の場合はマイナス符号をとるものとする。２粒子を状態 ξ_1 と ξ_2 に見出す確率は、

$$\begin{aligned}|\Psi(\xi_1,\xi_2)|^2 &= \frac{1}{2}[|\Psi_{12}(\xi_1,\xi_2)|^2 + |\Psi_{12}(\xi_2,\xi_1)|^2 \\ &\pm\Psi_{12}^*(\xi_1,\xi_2)\Psi_{12}(\xi_2,\xi_1) \pm \Psi_{12}(\xi_1,\xi_2)\Psi_{12}^*(\xi_2,\xi_1)]\end{aligned}$$

となる。右辺の最初の2項は対角項、残りは非対角項（干渉項）である。これから2粒子を同じ状態 ($\xi_1 = \xi_2$) に見出す確率は、非対角項が存在しない場合と比較してボース粒子の場合は二倍になり、フェルミ粒子の場合は0となることがわかる。後者はパウリの排他律に他ならない。この干渉効果は、2粒子の確率振幅の干渉効果であるという点で1粒子干渉を記述するヤングの干渉と異なっている。

同種粒子が N 個存在する場合は、N 粒子の確率振幅が干渉する。この場合、対角項の数が $N!$ なのに対して、非対角項の数は $N!(N!-1)$ もある。系がボース・アインシュタイン凝縮 (Bose-Einstein Condensation—BEC) を起こすと、これらすべての非対角項が対角項と同程度の寄与をするので、N 粒子を同じ状態に見出す確率は、非対角項が存在しない古典的な場合に比べて $N!$ 倍になる。この効果は粒子数が巨視的な場合は、状態に巨大な変化をもたらす。系の温度が下がって、粒子の熱的ドブロイ長が粒子間間隔と同程度になると、同種粒子は互いに区別がつかなくなり、干渉が強めあう状態に凝縮するのである。粒子数が大きいと、その変化は急激である。BEC が相転移として認識される所以である。BEC は、相互作用の助けを借りず起こる純粋に量子統計的な相転移であるという点で他のすべての相転移と異なっている。

このように BEC の本質は、確率分布に相当する対角項に比べて圧倒的多数存在する非対角項のもたらす多粒子干渉効果である。BEC が起こると系はマクロな波動関数で記述されるといわれる。このことは一体何を意味するのだろうか。この疑問に対する答えが次に述べる非対角長距離秩序である。この概念は、粒子間相互作用が存在する場合にも適用でき、また、粒子がフェルミ粒子である場合にも当てはめることができる。更に、BEC が起こると系が多くの場合超流動性を示すのはなぜかという疑問に対する示唆を得ることもできる。

4. 原子間相互作用の効果

トラップポテンシャルは非常によい近似で $V(\mathbf{r}) = M\omega^2\mathbf{r}^2/2$ のような放物型をしているので、トラップ中のボーズ粒子系の問題は、原子間相互作用を別にすれば調和振動子の問題と等価になる。BEC が起こる転移温度 T_{BEC} 付近では、原子数密度が低いので原子間相互作用は第ゼロ近似では無視できる。また、量子縮退の効果も小さいと考えられるのでエネルギー等分配則

$$\frac{M\omega^2 R^2}{2} \simeq \frac{p^2}{2M} \simeq \frac{3}{2}k_{\mathrm{B}}T$$

が近似的に成立する。ここで R は原子気体のおおよその大きさである。BEC の転移温度では、原子間の平均距離 $d \sim R/N^{\frac{1}{3}}$ はド・ブロイ波長 $\hbar/p \sim \hbar/(M\omega R)$ と同程度の大きさになるので両者を等しいとおくと $R \sim (\hbar/M\omega)^{\frac{1}{2}}N^{\frac{1}{6}}$ を得る。これを上式に代入すると、磁気トラップ中の BEC の転移温度として

$$k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{BEC}} \sim \hbar\omega N^{\frac{1}{3}}$$

が得られる。典型的な値として、$\omega = 10^3\mathrm{Hz}$、$N = 10^6$ を代入すると、$T_{\mathrm{BEC}} \sim 10^{-6}\mathrm{K}$ がえられる。これは、測定値とほぼ一致する。

原子が理想気体であるとすると、絶対零度ではすべての原子が調和振動子の最低エネルギー状態に落ち込んでいるはずである。この時の BEC の大きさ R は、$M\omega^2R^2/2 \sim \hbar\omega/4$ から $R \sim d_0 \equiv (\hbar/M\omega)^{\frac{1}{2}}$ となる。ここで、d_0 は調和振動子の基底状態の波動関数の大きさである。これに、典型的な値を代入すると R の大きさは $2-3\mu\mathrm{m}$ となる。ところが、

測定されたBECの大きさは、原子数が $N=10^6$ 程度になると R の10倍程度にもなる。これは、原子間相互作用の効果が十分低温では無視できないことを示している。

中性原子の原子間相互作用は、数Å程度の短距離では強い斥力が働き、100Å程度に及ぶ引力（主としてファン・デル・ワールス力）がこれに続く。極低温で弾性衝突する原子はこれら二つの力を感じ、正味の相互作用が引力か斥力かは一概には言えない。実験によると、^{1}H、^{23}Na、^{87}Rb は斥力相互作用をし、^{7}Li は引力相互作用をする。相互作用の及ぶ実効距離は、ファン・デル・ワールス・ポテンシャルが原子の運動エネルギーとつりあう距離であり、おおよそ数十Åであると見積もられる。ボゾンの場合、この距離はS波散乱長として知られ、実験値も同程度の値になっている。他方、平均原子間距離はこれよりもはるかに大きいために、原子間相互作用は局所的なデルタ関数型の相互作用として扱うことができ、このことが理論的な取り扱いを容易にしている。

相互作用の効果を最も精度よく測定できるのは、BECの集団励起の周波数の相互作用の強さ依存性を見ることである。系の温度が $T_{\rm BEC}$ の半分くらいになると、BECでないノーマル成分はほとんど観測できなくなるが、この温度領域での実験は絶対零度のボゴリウボフ理論と0.1%という高い精度で一致している。

5. 理想気体のボース・アインシュタイン凝縮

ボース・アインシュタイン凝縮 (BEC) は、通常は巨視的な数の粒子がある温度以下で同じ1粒子状態を占めるようになる相転移をいう。しかし、以下に述べるBECの本質を考えると、巨視的な数の粒子が同じ量子状態を占める現象は広い意味でBECであることがわかる。レーザー光は広義な意味でのBECの典型例である。

まず、理想気体のBECについて議論する。

理想ボース粒子系の**大分配関数** (grand partition function) は

$$\Xi=\prod_{\vec{k}}\sum_{n_{\vec{k}}=0}^{\infty}(e^{\beta(\mu-\epsilon_{\vec{k}})})^{n_{\vec{k}}},\quad \beta\equiv(k_{\rm B}T)^{-1} \tag{7}$$

で与えられる。ここで、$\epsilon_{\vec{k}}=\hbar^2k^2/2m$ は波数 $\vec{k}$ の粒子のエネルギー、μ は化学ポテンシャルである。右辺の幾何級数が収束するためには $e^{\beta(\mu-\epsilon_{\vec{k}})}<1$ でなければならない。一様な系の理想気体では $\epsilon_{\vec{k}}=0$ なる状態が存在するので $\mu\le 0$ でなければならない。このとき、(7) は収束し

$$\Xi=\prod_{\vec{k}}(1-e^{\beta(\mu-\epsilon_{\vec{k}})})^{-1} \tag{8}$$

となり、**熱力学的ポテンシャル** (thermodynamic potential)

$$\Omega=-\beta^{-1}\ln\Xi=\beta^{-1}\ln(1-e^{\beta(\mu-\epsilon_{\vec{k}})}) \tag{9}$$

が得られる。これから波数 $\vec{k}$ の量子状態を占める粒子の平均値は

$$\bar{n}_{\vec{k}}=-\frac{\partial\Omega_{\vec{k}}}{\partial\mu}=\frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\vec{k}}-\mu)}-1} \tag{10}$$

で与えられる。

化学ポテンシャル μ は、ボース粒子の総数の平均値が N に等しいという条件

$$N=\sum_{\vec{k}}\frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\vec{k}}-\mu)}-1} \tag{11}$$

右辺の和は公式

$$\sum_{\vec{k}} \to \frac{gV}{(2\pi)^D}\int d^D k \tag{12}$$

に従って積分に置き換えることができる。ここで、D は空間の次元、g はスピン縮退度と呼ばれる量で、スピンの大きさが S の場合 $g=2S+1$ で与えられる。3次元空間 $(D=3)$ の場合は (11) は次のように書き換えられる。

$$\frac{N}{V}=\frac{g}{(2\pi)^3}\int d^3k\frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\vec{k}}-\mu)}-1} \tag{13}$$

密度 N/V を一定にして温度を下げていくことを考えよう。このとき、右辺の非積分関数の分母の温度因子の存在のために等式 (13) の等式が成立し続けるためには化学ポテンシャルは増大しなければならない。

右辺が最大となるのは、$\mu=0$ の場合である。このときの温度を T_0 とすると

$$\frac{N}{V}=\frac{g(mk_{\mathrm{B}}T_0)^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty\frac{\sqrt{x}}{e^x-1}dx=g\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\left(\frac{mk_{\mathrm{B}}T_0}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \tag{14}$$

となる。ここで、積分公式

$$\int_0^\infty\frac{\sqrt{x}}{e^x-1}dx=\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\zeta\left(\frac{3}{2}\right)=\frac{\sqrt{\pi}}{2}\cdot 2.612 \tag{15}$$

を使った。(14) を温度について解くと次の結果が得られる。

$$k_{\mathrm{B}}T_0=\frac{2\pi}{(g\zeta(3/2))^{2/3}}\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}=\frac{3.31}{g^{2/3}}\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}} \tag{16}$$

T_0 より低温では化学ポテンシャルはゼロなので (13) の右辺の計算結果は (14) の右辺で T_0 を T で置き換えたものに等しくなる。

$$\frac{g}{(2\pi)^3}\int d^3k\frac{1}{e^{\beta\epsilon_{\vec{k}}}-1}=\frac{g(mk_{\mathrm{B}}T)^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty\frac{\sqrt{x}}{e^x-1}dx=g\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\left(\frac{mk_{\mathrm{B}}T}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \tag{17}$$

しかし、これは N/V よりも小さくなってしまう。実は、$T<T_0$ では (17) は正のエネルギー $(\epsilon_{\vec{k}}>0)$ を持った粒子に対してのみ正しい。なぜならば、エネルギーがゼロの粒子は (14) の被積分関数の因子 $\sqrt{x}$ のために積分に寄与できないからである。従って、$T<T_0$ では、エネルギーがゼロの粒子の数 N_0 を積分から分離する必要がある。$\epsilon>0$ の寄与は (16) を (17) に代入することにより

$$\frac{N_{\epsilon>0}}{V}=\left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{3}{2}} \tag{18}$$

と書けることに注意すると、$\epsilon=0$ の成分は次のように書ける。

$$\frac{N_{\epsilon=0}}{V}=1-\left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{3}{2}} \tag{19}$$

BEC が他の相転移と異なるのは、相互作用の助けを借りずに凝縮が起こるという点である。前節の最後で述べたように、同種粒子が同じ状態を占める確率は多粒子の干渉効果により粒子数 N 大きくなると急激に増大し、N が巨視的な場合は状態に巨大な変化をもたらす。絶対零度ですべての粒子が最低エネルギー状態を占めるのは不思議ではないが、相互作用無しに巨視的な数の粒子がある温度で突然1粒子状態を占めるようになるのは尋常ではない。アインシュタインはこの現象を「引力なしの凝縮」と呼んでいる。BEC は粒子間の相互作用を必要としないという意味で、純粋に量子統計的な相転移であるといえる。

6. 密度行列

空間の場所 $\vec{x}$ において粒子を生成あるいは消滅させる演算子を**場の演算子** (field operator) といい、それぞれ $\hat{\Psi}^\dagger(\vec{x})$、$\hat{\Psi}(\vec{x})$ と書く。場の演算子は、波数が $\vec{k}$ の粒子の生成・消滅演算子 $\hat{a}^\dagger_{\vec{k}}$、$\hat{a}_{\vec{k}}$ を用いて次のようにフーリエ展開できる (V は空間の体積)。

$$\hat{\Psi}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{x}}, \quad \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\vec{k}} \hat{a}^\dagger_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{x}} \tag{20}$$

考えている粒子がボース粒子の場合は、生成・消滅演算子が従う交換関係

$$[\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'}, \quad [\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{a}_{\vec{k}'}] = 0, \quad [\hat{a}^\dagger_{\vec{k}}, \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}] = 0 \tag{21}$$

から場の演算子の交換関係

$$[\hat{\Psi}(\vec{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{y})] = \delta(\vec{x}-\vec{y}), \quad [\hat{\Psi}(\vec{x}), \hat{\Psi}(\vec{y})] = 0, \quad [\hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{y})] = 0 \tag{22}$$

が導かれる。例えば、最初の等式は次のように導かれる。

$$[\hat{\Psi}(\vec{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{y})] = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k},\vec{k}'}[\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}]e^{i(\vec{k}\vec{x}-\vec{k}'\vec{y})} = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{x}-\vec{y})} = \delta(\vec{x}-\vec{y}), \tag{23}$$

他の等式も同様に証明できる。フェルミ粒子系の場合は、**反交換子** (anticommutator) を $\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ で定義すると (21) に対応する反交換関係

$$\{\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}\} = \delta_{\vec{k},\vec{k}'}, \quad \{\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{a}_{\vec{k}'}\} = 0, \quad \{\hat{a}^\dagger_{\vec{k}}, \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}\} = 0 \tag{24}$$

から場の演算子が従う反交換関係

$$\{\hat{\Psi}(\vec{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{y})\} = \delta(\vec{x}-\vec{y}), \quad \{\hat{\Psi}(\vec{x}), \hat{\Psi}(\vec{y})\} = 0, \quad \{\hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{y})\} = 0 \tag{25}$$

が導かれる。

波数 $\vec{k}$ の粒子が1個存在する状態 $|1_{\vec{k}}\rangle$ は真空状態 $|\mathrm{vac}\rangle$ に生成演算子を作用させることによって作ることができる。

$$|1_{\vec{k}}\rangle = \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}|\mathrm{vac}\rangle \tag{26}$$

これをフーリエ変換することにより空間の位置 $\vec{x}$ に粒子が1個存在する状態 $|\vec{x}\rangle$ を構成することができる。

$$|\vec{x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{x}}|1_{\vec{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{x}}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}}|\mathrm{vac}\rangle \tag{27}$$

これを (20) と比較すると

$$|\vec{x}\rangle = \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x})|\mathrm{vac}\rangle \tag{28}$$

であることがわかる。異なる $\vec{x} \neq \vec{x}'$ に対する状態 $|\vec{x}\rangle$ と $|\vec{x}'\rangle$ は直交している。実際、(20) より

$$\langle\vec{x}|\vec{x}'\rangle = \langle\mathrm{vac}|\hat{\Psi}(\vec{x}')\hat{\Psi}^\dagger(\vec{x})|\mathrm{vac}\rangle = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{x}-\vec{x}')} = \delta(\vec{x}-\vec{x}') \tag{29}$$

このように場の演算子 $\hat{\Psi}^\dagger(\vec{x})$ は位置 $\vec{x}$ に局在した粒子を生成する演算子であることがわかる。同様に、$\hat{\Psi}(\vec{x})$ は位置 $\vec{x}$ に局在した粒子を消滅させる演算子である。

位置 $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \cdots, \vec{x}_N$ に局在した状態ベクトルを

$$|\vec{x}_1, \vec{x}_2, \cdots, \vec{x}_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\Psi}(\vec{x}_1)\hat{\Psi}(\vec{x}_2)\cdots\hat{\Psi}(\vec{x}_N)|\mathrm{vac}\rangle \tag{30}$$

で定義する。この状態が満足する規格化条件は、ボース粒子系の場合は

$$\langle\vec{x}'_1, \vec{x}'_2, \cdots, \vec{x}'_N|\vec{x}_1, \vec{x}_2, \cdots, \vec{x}_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_\sigma \delta(\vec{x}'_1 - \vec{x}_{\sigma(1)})\delta(\vec{x}'_2 - \vec{x}_{\sigma(2)})\cdots\delta(\vec{x}'_N - \vec{x}_{\sigma(N)}) \tag{31}$$

であり、フェルミ粒子系の場合は

$$\langle\vec{x}'_1, \vec{x}'_2, \cdots, \vec{x}'_N|\vec{x}_1, \vec{x}_2, \cdots, \vec{x}_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_\sigma \mathrm{sgn}(\sigma)\delta(\vec{x}'_1 - \vec{x}_{\sigma(1)})\delta(\vec{x}'_2 - \vec{x}_{\sigma(2)})\cdots\delta(\vec{x}'_N - \vec{x}_{\sigma(N)}) \tag{32}$$

で与えられる。ここで、σ は置換演算子である。ここでは、$N=2$ の場合について証明を行い、一般の証明は読者にゆだねる。$\hat{\Psi}(\vec{x})|\mathrm{vac}\rangle = 0$ であることを使うと

$$\begin{aligned}
\langle\vec{x}'_1, \vec{x}'_2|\vec{x}_1, \vec{x}_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\langle\mathrm{vac}|\hat{\Psi}(\vec{x}'_2)\hat{\Psi}(\vec{x}'_1)\hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}_1)\hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}_2)|\mathrm{vac}\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\langle\mathrm{vac}|\hat{\Psi}(\vec{x}'_2)(\delta(\vec{x}'_1 - \vec{x}_1)\hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}_2) \pm \delta(\vec{x}'_1 - \vec{x}_2)\hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}_1)]|\mathrm{vac}\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(\delta(\vec{x}'_1 - \vec{x}_1)\delta(\vec{x}'_2 - \vec{x}_2) \pm \delta(\vec{x}'_1 - \vec{x}_2)\delta(\vec{x}'_2 - \vec{x}_1))
\end{aligned}$$

ここで、プラス符号はボース粒子系、マイナス符号はフェルミ粒子系に対応している。

N 粒子からなる系が状態 $|\Phi\rangle$ にあるとき、この状態に対する**1粒子密度行列** (single-particle density matrix) $\rho_1(\vec{x}, \vec{y})$ は次式で定義される。

$$\rho_1(\vec{x}, \vec{y}) = \langle\Phi|\hat{\Psi}^\dagger(\vec{x})\hat{\Psi}(\vec{y})|\Phi\rangle \tag{33}$$

これは、状態 $|\Phi\rangle$ にある系の位置 $\vec{y}$ で粒子を1個消滅させ、位置 $\vec{x}$ に粒子を1個つけ加えても系がもとと同じ状態 $|\Phi\rangle$ にとどまる確率振幅を表している。特に $\vec{x} = \vec{y}$ の場合の1粒子密度行列

$$\rho_1(\vec{x}, \vec{x}) = \langle\Phi|\hat{\Psi}^\dagger(\vec{x})\hat{\Psi}(\vec{x})|\Phi\rangle \tag{34}$$

は位置 $\vec{x}$ における粒子数密度を与える。

系が直交するいろいろな状態 $|\Phi_n\rangle$ $(n = 1, 2, \cdots)$ に確率 p_n で分布している場合は、1 粒子密度行列は次のように与えられる。

$$\rho_1(\vec{x}, \vec{y}) = \sum_n p_n \langle \Phi_n | \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\Psi}(\vec{y}) | \Phi_n \rangle \tag{35}$$

N 粒子系の任意の完全基底 $\{|n\rangle\}$ をとり、(35) の右辺に完全系 $\sum_m |m\rangle\langle m| = \hat{I}$ を挿入すると

$$\begin{aligned} \rho_1(\vec{x}, \vec{y}) &= \sum_{n,m} p_n \langle \Phi_n | \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\Psi}(\vec{y}) | m \rangle \langle m | \Phi_n \rangle = \sum_{n,m} p_n \langle m | \Phi_n \rangle \langle \Phi_n | \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\Psi}(\vec{y}) | m \rangle \\ &= \mathrm{Tr}\{\sum_n p_n |\Phi_n\rangle\langle\Phi_n| \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\Psi}(\vec{y})\} = \mathrm{Tr}\{\hat{\rho} \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\Psi}(\vec{y})\} \end{aligned} \tag{36}$$

ここで、

$$\hat{\rho} \equiv \sum_n p_n |\Phi_n\rangle\langle\Phi_n| \tag{37}$$

は系の**密度演算子** (density operator) と呼ばれる。以下では $\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\hat{A}\}$ を単に $\langle\hat{A}\rangle$ と書く。こうして

$$\rho_1(\vec{x}, \vec{y}) = \mathrm{Tr}\{\hat{\rho} \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\Psi}(\vec{y})\} = \langle \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\Psi}(\vec{y}) \rangle \tag{38}$$

が得られる。

7. 非対角長距離秩序

(20) を (38) へ代入すると

$$\rho_1(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \langle \hat{a}^\dagger_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{q}} \rangle e^{-i(\vec{k}\vec{x} - \vec{q}\vec{y})} \tag{39}$$

系が空間的に一様で熱平衡状態にある場合は

$$\langle \hat{a}^\dagger_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{q}} \rangle = \delta_{\vec{k},\vec{q}} \langle \hat{a}^\dagger_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}} \rangle \equiv \delta_{\vec{k},\vec{q}} \langle \hat{n}_{\vec{k}} \rangle \tag{40}$$

が成立する。これを示すためにまず、運動量演算子

$$\hat{\mathbf{P}} = \hbar \sum_{\vec{p}} \vec{p} \hat{a}^\dagger_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}} \tag{41}$$

と $\hat{a}^\dagger_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{q}}$ との交換関係を計算すると

$$[\hat{\mathbf{P}}, \hat{a}^\dagger_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{q}}] = \hbar \sum_{\vec{p}} [\hat{a}^\dagger_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}}, \hat{a}^\dagger_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{q}}] = \hbar(\vec{k} - \vec{q}) \hat{a}^\dagger_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{q}} \tag{42}$$

熱平衡状態にある系の密度演算子は、ハミルトニアン $\hat{H}$ と温度の逆数 $\beta \equiv 1/(k_{\mathrm{B}}T)$ (k_{B} はボルツマン定数) を用いて

$$\hat{\rho} = Z^{-1} e^{-\beta \hat{H}}, \quad Z \equiv \mathrm{Tr}\{e^{-\beta \hat{H}}\} \tag{43}$$

と書けるので空間的に一様な系ではハミルトニアンと運動量演算子が交換することを用いると

$$\begin{aligned}\langle[\hat{\mathbf{P}}, \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}}]\rangle &= Z^{-1}\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}(\hat{\mathbf{P}}\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}} - \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}}\hat{\mathbf{P}})\} = Z^{-1}\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}\hat{\mathbf{P}}\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}} - \hat{\mathbf{P}}e^{-\beta\hat{H}}\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}}\} \\ &= Z^{-1}\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}\hat{\mathbf{P}}\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}} - e^{-\beta\hat{H}}\hat{\mathbf{P}}\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}}\} = 0\end{aligned}$$

よって (42) から $(\vec{k}-\vec{q})\langle\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}}\rangle = 0$ となり、(40) が成立することがわかる。

(40) を (39) に代入すると

$$\rho_1(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}}\langle\hat{n}_{\vec{k}}\rangle e^{-i\vec{k}(\vec{x}-\vec{y})} = \frac{\langle\hat{n}_0\rangle}{V} + \int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\langle\hat{n}_{\vec{k}}\rangle e^{-i\vec{k}(\vec{x}-\vec{y})} \tag{44}$$

ここで最後の等式において、$\vec{k}=\vec{0}$ の成分を分離し、その他の成分は和を積分に置き換えた。右辺の積分は $|\vec{x}-\vec{y}|\to\infty$ の極限をとると因子 $e^{-i\vec{k}(\vec{x}-\vec{y})}$ が激しく振動するためにゼロとなる (Riemann-Legesque の定理)。よって、次の結果が得られる。

$$\lim_{|\vec{x}-\vec{y}|\to\infty}\rho_1(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{\langle\hat{n}_0\rangle}{V} \tag{45}$$

粒子数密度 N/V を一定にしつつ N と V を無限大にするという熱力学的極限においても左辺がゼロとならない、すなわち、系が非対角的 (すなわち、$\vec{x}\neq\vec{y}$) な長距離秩序を持つためには、$\langle\hat{n}_0\rangle$ が体積に比例して増大しなければならない。フェルミ粒子系の場合はパウリの排他原理より常に $\langle\hat{n}_0\rangle\leq 1$ なので、1粒子密度行列のレベルでは非対角長距離秩序は存在できない。他方、ボース粒子系の場合に $\vec{k}=0$ の状態にボース・アインシュタイン凝縮すると $\langle\hat{n}_0\rangle$ は体積に比例して増大するので ((19) 参照) (45) の左辺はゼロにならない。このように、ボース・アインシュタイン凝縮の本質は、**非対角長距離秩序** (off-diagonal long-range order, ODLRO) にある。

ボース凝縮している粒子数密度 $\langle\hat{n}_0\rangle/V$ は、ある場所 $\vec{y}$ で粒子を取り出しそれを遠方の場所 $\vec{x}$ に移動しても系が元と同じ量子状態に戻る確率振幅を与える。粒子が系の状態を乱すことなく ($\vec{y}$ から $\vec{x}$ へと) 長距離を移動できることは、BEC と超流動性との密接な関係を示唆している。

対比として、T_0 よりも十分高温側での1粒子密度演算子の振る舞いを調べてみよう。このとき、BEC は存在しないので (44) の右辺の第一項はゼロ、第二項において $\langle\hat{n}_{\vec{k}}\rangle$ は古典統計分布 (マックスウェルーボルツマン分布)

$$\langle\hat{n}_{\vec{k}}\rangle = e^{\beta(\mu-\epsilon_{\vec{k}})} \tag{46}$$

に従う。ここで、化学ポテンシャル μ は $\langle\hat{n}_{\vec{k}}\rangle$ の k 積分が全粒子数密度 n に等しいという条件から決められる。すなわち、

$$n = \int d^3k\langle\hat{n}_{\vec{k}}\rangle = e^{\beta\mu}\left(\int dke^{-\beta\frac{\hbar^2k^2}{2m}}\right)^3 = e^{\beta\mu}\left(\frac{2\pi m}{\beta\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \to \mu = \frac{3}{2}k_{\mathrm{B}}T\ln\left(\frac{\hbar^2 n^{\frac{2}{3}}}{2\pi m k_{\mathrm{B}}T}\right) \tag{47}$$

これから、高温では化学ポテンシャルは負であることがわかる。(46) を (44) に代入して計算すると

$$\rho_1(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{n}{8\pi^3}e^{-\frac{mk_{\mathrm{B}}T}{2\hbar^2}|\vec{x}-\vec{y}|^2} \tag{48}$$

となる。これは高温極限 $T \to \infty$ では $\vec{x} = \vec{y}$ なる対角項のみが残ることを示している。

(48) から非対角秩序が減衰する特徴的な長さが

$$\lambda = \sqrt{2\pi \frac{\hbar^2}{mk_{\mathrm{B}}T}} = \frac{h}{\sqrt{2\pi mk_{\mathrm{B}}T}} \tag{49}$$

で与えられることがわかる (数因子 2π は慣習上導入されたもので本質的ではない)。λ は**熱的ド・ブロイ長** (thermal de Broglie length) と呼ばれる。これは光のコヒーレンス長に相当する長さで、原子の位相は熱的ド・ブロイ長程度の距離にわたり一定に保たれる。特に、BEC が存在すると (45) より系全体にわたり位相がそろう。

理想ボース気体の場合、全粒子数を N、最低一粒子準位にある粒子数を N_0 とすると、熱平衡状態で BEC が存在するための条件は、「N_0 が N と同程度の大きさとなる」ことである。ここで、「同程度の大きさ」とは粒子数密度を一定としつつ粒子数と体積を無限大とする熱力学的極限をとった場合に、比 N_0/N がゼロにならないことを意味する。しかし、超流動ヘリウムのように粒子間相互作用が存在する場合は、一粒子エネルギー準位という概念は明確な意味を持たない。そこでペンローズとオンサーガーは、BEC の概念を次のように拡張した[2]。

N 粒子系の密度演算子を ρ を用いて一粒子の還元密度演算子を次のように定義しよう。

$$\hat{\rho}_1 = N\mathrm{Tr}_{2,3,\cdots,N}\hat{\rho} \tag{50}$$

ここで、$2,3,\cdots,N$ は1番目の粒子以外についてトレースを取ることを示している（同種粒子であるから、他の任意の $N-1$ 個の粒子についてトレースをとっても同じ結果が得られる)。密度演算子の座標表示

$$\rho(\vec{x}_1,\cdots,\vec{x}_N;\vec{y}_1,\cdots,\vec{y}_N) = \langle \vec{y}_1,\cdots,\vec{y}_N|\hat{\rho}|\vec{x}_1,\cdots,\vec{x}_N\rangle \tag{51}$$

を用いると、(50) は次のように書ける。

$$\rho_1(\vec{x},\vec{y}) = \langle\vec{y}|\hat{\rho}_1|\vec{x}\rangle = \int d\vec{x}_2\cdots\int d\vec{x}_N \rho(\vec{x},\vec{x}_2,\cdots,\vec{x}_N;\vec{y},\vec{x}_2,\cdots,\vec{x}_N) \tag{52}$$

これが (34) と同等であることは容易に示すことが出来る。

ρ_1 を対角化して得られる固有値の最大値を $n^{(1)}_{\max}$ とすると、BEC が存在するための条件は、「$n^{(1)}_{\max}$ が N と同程度の大きさとなる」、すなわち、比 $n^{(1)}_{\max}/N$ が熱力学的極限でゼロとならないことである。以下では、そのような固有値が1つしか存在しないものと仮定して話を進めよう。空間的に一様な系では運動量がよい量子数であるから、この場合の BEC の条件は巨視的な数の粒子が同じ運動量状態を占めることである。

N と同程度の最大固有値に対応する固有状態を $|\Psi\rangle$ とすると、$\hat{\rho}_1$ は次のようにスペクトル分解できる。

$$\hat{\rho}_1 = n^{(1)}_{\max}|\Psi\rangle\langle\Psi| + \sum_{\nu} n^{(1)}_{\nu}|\nu\rangle\langle\nu| \tag{53}$$

ここで、$n^{(1)}_{\max}$ 以外の固有値 $n^{(1)}_{\nu}$ は仮定により、1と同程度かそれ以下の大きさである。座標表示をとると、

$$\langle\vec{y}|\hat{\rho}_1|\vec{x}\rangle = n^{(1)}_{\max}\langle\vec{y}|\Psi\rangle\langle\Psi|\vec{x}\rangle + \sum_{\nu} n^{(1)}_{\nu}\langle\vec{y}|\nu\rangle\langle\nu|\vec{x}\rangle \tag{54}$$

[2] O. Penrose and L. Onsager, Phys. Rev. **104** (1956) 576

波動関数は $1/\sqrt{V}$ (V は系の体積) のオーダーなので熱力学的極限あるいは $|\vec{x}-\vec{y}| \to \infty$ なる極限をとると右辺の第一項以外の項はゼロとなる。従って、$\Psi(\vec{x})$ を

$$\Psi(\vec{x}) \equiv \sqrt{n_{\rm max}^{(1)}} \langle \vec{x}|\Psi\rangle \tag{55}$$

と定義すると BEC の条件は、$|\vec{x}-\vec{y}| \to \infty$ で

$$\langle \vec{y}|\hat{\rho}_1|\vec{x}\rangle \to \Psi(\vec{y})\Psi^*(\vec{x}) \tag{56}$$

となること、すなわち、非対角長距離秩序 (ODLRO) を持つ事であると言える。(56) が成立すると、$\Psi(\vec{x})$ は非常に良い近似で行列 $\rho_1(\vec{x},\vec{y})$ の固有関数になることがわかる。

$$\int d\vec{y}\Psi(\vec{y})\rho_1(\vec{y},\vec{x}) \simeq n_{\rm max}^{(1)}\Psi(\vec{x}), \quad n_{\rm max}^{(1)} = \int d\vec{x}|\Psi(\vec{x})|^2 \tag{57}$$

$\Psi(\vec{x})$ は、**秩序パラメーター** (order parameter) または、**凝縮体の波動関数** (condensate wavefunction) と呼ばれ、その空間積分 $\int |\Psi(\vec{x})|^2 d\vec{x} = n_{\rm max}^{(1)}$ は凝縮体に含まれる粒子数であると解釈できる。このとき、N と同程度の巨視的な数の原子が Ψ で記述される同じ量子状態を占めて完全に同じように振舞う結果、ミクロな量子効果がマクロなスケールへと増幅される。

固体における結晶の周期構造も長距離秩序の一例であるが、これは、粒子数密度に関する対角的 ($\vec{x}=\vec{y}$) な長距離秩序である。これに対して、ODLRO は、密度だけでなく位相にも依存しており、後述するようにこの位相の空間変化が超流動や超伝導を引き起こす。また、巨視的な波動関数 Ψ は新しい熱力学的変数としての役割も果たす (BEC になると Ψ が熱力学的極限でも消えないことを思い出そう)。ODLRO は、ルビジウム原子のボース・アインシュタイン凝縮を用いて最近になって直接的に観測された[3] 。

(56) はしばしば

$$\rho_1(\vec{x},\vec{y}) = \langle \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x})\hat{\Psi}(\vec{y})\rangle \longrightarrow \langle \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x})\rangle\langle\hat{\Psi}(\vec{y})\rangle \tag{58}$$

の形に書かれる。ここで、右辺に現れる $\langle\cdots\rangle$ の意味は、厳密に同じ状態に対する期待値とみなすべきではなく、粒子数が 1 だけ違う状態間の行列要素とみなすべきである。粒子数が n の状態に消滅演算子が作用すると因子 $\sqrt{n}$ が現れることを思い出すと、行列要素の中で主要な項は BEC の数だけが 1 だけ変化し、他の状態は変化しない行列要素であることがわかる。BEC の原子数を n_0、その他の状態を全部まとめて ξ と書くと

$$\langle\hat{\Psi}(\vec{x})\rangle \;=\; \langle n_{\rm M}-1,\xi|\hat{\Psi}|n_{\rm M},\xi\rangle \tag{59}$$

8. フェルミ粒子系における非対角長距離秩序

理想フェルミ粒子系の大分配関数は各状態の占有数が 0 または 1 なので

$$\Xi = \prod_{\vec{k}} \sum_{n_{\vec{k}}=0}^{1} (e^{\beta(\mu-\epsilon_{\vec{k}})})^{n_{\vec{k}}} = \prod_{\vec{k}}(1+e^{\beta(\mu-\epsilon_{\vec{k}})}) \tag{60}$$

で与えられる。熱力学的ポテンシャルは

$$\Omega = -\beta^{-1}\ln\Xi = -\beta^{-1}\ln(1+e^{\beta(\mu-\epsilon_{\vec{k}})}) \tag{61}$$

[3] I. Bloch, T. Hänsch, T. Esslinger, Nature **403** (2000) 166

で与えられる。これから波数 $\vec{k}$ の量子状態を占める粒子の平均値は

$$\bar{n}_{\vec{k}} = -\frac{\partial \Omega_{\vec{k}}}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\vec{k}}-\mu)}+1} \tag{62}$$

となる。特に絶対零度では (62) は

$$n_{\vec{k}} = \theta(k_{\mathrm{F}} - |\vec{k}|) \tag{63}$$

でとなる。ここで、$\theta(x)$ は $x>0$ で 1、$x<0$ で 0、$x=0$ で 1/2 の値をとる**階段関数** (step function) である。こうして、絶対零度ではフェルミ粒子系は波数の大きさが 0 からフェルミ波数 k_{F} のところまで各状態に粒子が 1 個ずつ詰まっており、それ以上の状態は空である。

フェルミ粒子系の場合は、パウリの排他律により ρ_1 の最大固有値は 1 以上にはなれず、系が 1 粒子状態に凝縮することはない。それゆえ、理想フェルミ気体は ODLRO を示さず BEC は起きない。

問題 絶対零度に対する理想フェルミ気体に対して 1 粒子密度行列を計算して、それが

$$\langle \vec{x}|\rho_1|\vec{y}\rangle = \frac{1}{2\pi^2 r_{12}^3}(\sin k_{\mathrm{F}} r_{12} - k_{\mathrm{F}} r_{12}\cos k_{\mathrm{F}} r_{12}) \tag{64}$$

となることを示せ。この結果から、 $r_{12} \equiv |\vec{x}-\vec{y}| \to \infty$ で $\langle \vec{x}|\rho_1|\vec{y}\rangle \to 0$ となることがわかる。

解答 (63) を

$$\langle \vec{x}|\rho_1|\vec{y}\rangle = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{x}-\vec{y})} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3k n_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{x}-\vec{y})}$$

に代入すると

$$\langle \vec{x}|\rho_1|\vec{y}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{k_{\mathrm{F}}} dk k^2 \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta e^{ik|\vec{x}-\vec{y}|\cos\theta}$$

これを積分すると (64) が得られる (証明終わり)。

フェルミ粒子系が ODLRO を示すためには、最低限 2 個のフェルミ粒子が対を作りそれがボース凝縮を起こす必要がある。これを見るために、2 粒子の還元密度演算子

$$\rho_2 = N\mathrm{Tr}_{3,4,\cdots,N} \tag{65}$$

を考え、それを対角化して得られる固有値の最大値 $n^{(2)}_{\mathrm{max}}$ を考えよう。このとき、一般に、$n^{(2)}_{\mathrm{max}} \le N$ であることが示される[4] 。今、2 粒子の還元密度演算子が N と同じ程度の大きさの固有値 $n^{(2)}_{\mathrm{max}}$ を持つとし、それに対応する固有状態を $|\phi\rangle$ と書こう。このとき、ρ_2 は次のようにスペクトル分解される。

$$\rho_2 = n^{(2)}_{\mathrm{max}}|\phi\rangle\langle\phi| + \sum_{\mu} n^{(2)}_{\mu}|\mu\rangle\langle\mu| \tag{66}$$

[4] C. N. Yang, Rev. Mod. Phys. **34** (1962) 694

両辺の座標表示を取り、$\Phi(\vec{r}'_1, \mathbf{r}'_2) = \sqrt{n^{(2)}_{\max}}\langle \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2|\phi\rangle$ 等とおくと

$$\langle \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2|\rho_2|\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\rangle = \Phi(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2)\Phi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \sum_\mu n^{(2)}_\mu \langle \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2|\mu\rangle\langle\mu|\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\rangle \tag{67}$$

ボース粒子の場合と同様の議論により、$|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1| \to \infty$ とすると右辺の第1項以外は消えるが、右辺の第一項は $\mathbf{r}_1 \simeq \mathbf{r}'_1$ かつ $\mathbf{r}_2 \simeq \mathbf{r}'_2$ であれば残る。このとき $\langle \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2|\phi\rangle$ は、$1/\sqrt{V}$ (V は系の体積) のオーダーなので、$n^{(2)}_{\max}$ が N と同程度であれば、熱力学的極限をとっても右辺の第一項は残ることがわかる。このときフェルミ粒子系は2粒子の ODLRO をもち、$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ は秩序パラメターまたはクーパー対の波動関数とみなすことができる。

超伝導やヘリウム3超流動状態では2個の電子やヘリウム原子がクーパー対を作り、それらがボース凝縮した状態であると考えられる。この場合、上記の $n^{(2)}_{\max}$ は N のオーダーの固有値を持つことが示せ、上記の議論がそのまま当てはまる。上記の議論はさらに一般化することが可能である。例えば、^{4}He の超流動は、^{4}He 原子集団の BEC とみなす代わりに、^{4}He 原子核と電子の集団とみなして、原子核と電子2個の3粒子還元密度演算子 $\langle \mathrm{He}', e'_1, e'_2|\rho_3|\mathrm{He}, e_1, e_2\rangle$ が ODLRO を持つ状態であると考えることもできる。

9. ボース粒子系の多体波動関数の性質

ボース粒子系の基底状態の波動関数は実数に取ることができ、境界条件と規格化条件を満足しながら**エネルギー汎関数** (energy functional)

$$F[\Psi] = \int d\vec{x}_1 \cdots \int d\vec{x}_N \left[\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i (\nabla_i \Psi)^2 + V(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \cdots, \vec{x}_N)\Psi^2\right] \tag{68}$$

を最小化するという変分原理から求められる。ここで、$V(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \cdots, \vec{x}_N)$ は粒子間の相互作用ポテンシャルであり、発散はしないものと仮定する。Ψ の規格化条件を満足するためにラグランジュの未定乗数 E を導入して

$$\frac{\delta}{\delta\Psi}\left(F - E\int d\vec{x}_1 \cdots \int d\vec{x}_N |\Psi|^2\right) = 0 \tag{69}$$

よりシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i \nabla_i^2 + V(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \cdots, \vec{x}_N)\right)\Psi = E\Psi \tag{70}$$

が得られる。

同種ボース粒子系の多体波動関数は粒子の入れ替えに対して対称である。

$$\Psi(\cdots, \vec{x}_i, \cdots, \vec{x}_j, \cdots) = \Psi(\cdots, \vec{x}_j, \cdots, \vec{x}_i, \cdots) \tag{71}$$

今、任意の2つの座標 $\vec{x}_i$ と $\vec{x}_j$ をとり、$\vec{x}_j$ を固定して波動関数を $\vec{x}_i - \vec{x}_j$ の関数とみなすと、波動関数の対称性から Ψ は $\vec{x}_i - \vec{x}_j$ の偶関数でなければならない。この関数が、$\vec{x}_i$ のある値のところで符号を変えたとしよう。このとき、$|\Psi|$ も上記の変分原理を満足するので解である。ところが、その場所で $|\Psi|$ の一階微分は不連続となる。しかし、ポテンシャルエネルギーが有限な領域では $|\Psi|$ の一階微分は至る所連続でなければならないので矛盾する。従って、Ψ は非負にとることができる。

さて、Ψ_1 と Ψ_2 をこのような条件を満たす2つの非負な解であるとすると、シュレーディンガー方程式の線形性より $\Psi_1 - \Psi_2$ も最低エネルギー固有値に属する解であり符号を変えない。しかし、これは Ψ_1 と Ψ_2 が規格化されているという仮定に矛盾する。以上の結果より、ボース粒子系の基底状態の波動関数は非負でかつ縮退はない。

同種ボース粒子の波動関数は、任意の2つの粒子の入れ替えに対して対称である。これは、基底状態の波動関数だけでなく励起状態の波動関数に対しても成立する。いま、$\Psi_0(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \cdots, \vec{x}_N; t)$ を基底状態の波動関数とするとする。励起状態の波動関数は、基底状態の波動関数が緩やかに変化を受けたものであろう。そのようなもので対称性の要請を満足するものの一つは

$$\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \cdots, \vec{x}_N; t) = \exp\left(i \sum_{j=1}^{N} \phi(\vec{x}_j, t)\right) \Psi_0(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \cdots, \vec{x}_N; t) \tag{72}$$

である。

ϕ が実数の場合は、$|\Psi|^2 = |\Psi_0|^2$ なので密度の変化を伴わない。にもかかわらず、ϕ が空間的に変化すると局所的な速度場

$$\vec{v}_{\mathrm{s}} = \frac{\hbar}{m} \nabla \phi \tag{73}$$

が生じる。

ϕ が虚部を持つ場合は、励起は密度の変化を伴い音波となる。音波の速度を $v_x = c\cos(kx - \omega t)$ とすると、それに伴う密度波は連続の方程式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x) = 0 \tag{74}$$

を満足するという条件から

$$\rho = \rho_0 \left(1 + \frac{ck}{\omega} \cos(kx - \omega t)\right) \tag{75}$$

と書ける。そのような励起を記述する波動関数は視察により

$$\Psi = \exp\left[i \frac{mc}{\hbar k} \sum_j \sin(kx_j - \omega t) + \frac{ck}{2\omega} \sum_j \cos(kx_j - \omega t)\right] \Psi_0 \tag{76}$$

と書ける。実際、

$$j_x = \frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^* \frac{\partial}{\partial x_j} \Psi - \Psi \frac{\partial}{\partial x_j} \Psi^*\right) = c\cos(kx_j - \omega t) e^{\frac{ck}{\omega} \sum_j \cos(kx_j - \omega t)} \Psi_0^2 = v_x \rho \tag{77}$$

(76) を振幅について線形化すると1フォノン状態の多体波動関数

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikx_j} \Psi_0 \tag{78}$$

が得られる。

10. 非平衡なBECと超流動

系の状態が時間的に変化する非平衡な場合に拡張して考える。各時刻において、(50) で定義される1粒子密度演算子を対角的にする表示をとると

$$\hat{\rho}_1(t) = \sum_\nu n_\nu(t)|\nu(t)\rangle\langle\nu(t)| \tag{79}$$

両辺の座標表示をとると

$$\rho_1(\vec{x},\vec{y};t) = \langle\vec{y}|\hat{\rho}_1(t)|\vec{x}\rangle = \sum_\nu n_\nu(t)\langle\vec{y}|\nu(t)\rangle\langle\nu(t)|\vec{x}\rangle = \sum_\nu n_\nu(t)\psi_\nu^*(\vec{x},t)\psi_\nu(\vec{y},t) \tag{80}$$

ν でラベルづけされる状態のうちで、ボース凝縮している状態が1つだけ存在すると仮定し、それを $\nu=0$ としよう。このとき、$n_0 \sim O(N)$ で他の状態に対しては $n_{\nu\neq 0} \sim O(1)$ である。$\nu=0$ 以外の状態はすべて $O(1)$ のオーダーの微小量でしかも互いに直交しているので、$|\vec{x}-\vec{y}| \to \infty$ では (44) の右辺の第二項と同様に打ち消しあい、$\nu=0$ の項の寄与に比べて無視することができる。従って、

$$\lim_{|\vec{x}-\vec{y}|\to\infty} \rho_1(\vec{x},\vec{y};t) = n_0(t)\psi_0^*(\vec{x},t)\psi_0(\vec{y},t) \equiv \Psi_0^*(\vec{x},t)\Psi_0(\vec{y},t) \tag{81}$$

ここで、$\Psi_0(\vec{x},t) \equiv \sqrt{n_0(t)}\psi_0(\vec{x},t)$ は非平衡な系における凝縮体の波動関数（秩序パラメーター）である。凝縮体の粒子数密度は

$$\rho(\vec{x},t) = |\Psi_0(\vec{x},t)|^2 \tag{82}$$

で与えられる。連続の方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{x},t) + \mathrm{div}\vec{j}(\vec{x},t) = 0 \tag{83}$$

を満足する粒子の流れの密度は次式で与えられる。

$$\vec{j}(\vec{x},t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi_0^*(\vec{x},t)\nabla\Psi_0(\vec{x},t) - \Psi_0(\vec{x},t)\nabla\Psi_0^*(\vec{x},t)\right) \tag{84}$$

秩序パラメーター $\Psi_0(\vec{x},t)$ を

$$\Psi_0(\vec{x},t) = A(\vec{x},t)e^{i\phi(\vec{x},t)} \tag{85}$$

のように振幅と位相に分けて、これを (82)、(84) に代入すると

$$\rho(\vec{x},t) = A^2(\vec{x},t) \tag{86}$$

$$\vec{j}(\vec{x},t) = A^2(\vec{x},t)\frac{\hbar}{m}\nabla\phi(\vec{x},t) \tag{87}$$

が得られる。**超流動速度** (superfluid velocity) $\vec{v}_s$ は $\vec{j}(\vec{x},t)$ と $\rho(\vec{x},t)$ の比として定義される。

$$\vec{v}_s(\vec{x},t) \equiv \frac{\vec{j}(\vec{x},t)}{\rho(\vec{x},t)} = \frac{\hbar}{m}\nabla\phi(\vec{x},t) \tag{88}$$

凝縮体の位相は超流動速度に対するポテンシャルの役割を果たしていることがわかる。これから、超流動体が存在している領域では渦無しの条件

$$\mathrm{rot}\vec{v}_\mathrm{s} = 0 \tag{89}$$

が成立していることがわかる。超流動速度を超流動体内の任意の閉曲線 C に沿った線積分

$$\Gamma \equiv \oint_C \vec{v}_\mathrm{s} d\vec{l} = \int \mathrm{rot}\vec{v}_\mathrm{s} d\vec{S} \tag{90}$$

は**循環** (circulation) と呼ばれ、C に沿った超流動体の流れを特徴づける量である。ここで $d\vec{l}$ は曲線 C に沿った無限小の線ベクトル、$d\vec{S}$ は C の内側の面要素でベクトルは面に垂直方向を向いている。もし、C 内の至る所で条件 (89) が成立すれば $\Gamma = 0$ となる。しかし、C 内で Ψ がゼロとなる点が存在すれば、その点では位相 ϕ は定義できないので、条件 (89) は必ずしも成立せず、Γ は必ずしもゼロとなる必要はない。他方、量子力学的には Γ は任意の値を取ることができない。これを見るために、(90) に $\vec{v}_\mathrm{s}$ に (88) を代入すると

$$\Gamma \equiv \frac{\hbar}{m} \oint_C \nabla\phi(\vec{x}, t) d\vec{l} \tag{91}$$

凝縮体の波動関数の一価性より右辺の積分は 2π の整数倍の値しか取れないことがわかる。これから

$$\Gamma = \kappa_0 n, \quad \kappa \equiv \frac{h}{m} \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots) \tag{92}$$

このように循環は h/m の整数倍しか取れない。これを**循環の量子化** (quantization of circulation) という[5]。

超流動体の入ったビーカーを回転させると、液体の表面には通常の流体と同じように放物線型のくぼみ (meniscus) が生じる。これは、循環の値がゼロでないことを示している。オンサーガーは、$\mathrm{rot}\vec{v}_s$ が表面の微小な領域でのみゼロでない値をとることを仮定することによりこの問題が解決できることを指摘した。その領域では、超流動体密度はゼロとなるので $\mathrm{rot}\vec{v}_s$ はゼロと異なる値を取れる。ビーカーの半径を R、角速度を Ω とすると

$$\oint \vec{v}_s d\vec{l} = \Omega R \cdot 2\pi R = 2\pi R^2 \cdot \Omega = n\frac{h}{m} \equiv n\kappa_0 \tag{93}$$

これから渦糸が密度 $n/\pi R^2 = 2\omega/\kappa_0$ で分布していると仮定することにより観測されている液体表面のくぼみを理解できる。

11. オイラー方程式

ボース粒子系の場の演算子は交換関係

$$[\hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}')] = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \tag{94}$$

[5] 循環の量子化は、BEC が一つの巨視的波動関数 Ψ で記述されるということを仮定して導かれている。このことは、ヘリウム 4 のような斥力相互作用をする内部自由度を持たない BEC の場合は正しいが、引力相互作用をする場合や内部自由度をもつ BEC の場合は複数の BEC が共存する場合があり、循環が必ずしも量子化されるとは限らない。

を満足する。$\hat{\Psi}(\vec{r})$ を (85) の形に形式的に分解しよう。

$$\hat{\Psi}(\vec{r}) = \sqrt{\hat{\rho}(\vec{r})}e^{i\hat{\varphi}(\vec{r})} \tag{95}$$

(94) と (95) が両立するためには、演算子 $\hat{\rho}$ と $\hat{\varphi}$ の間に次の交換関係が成立すれば十分である。

$$[\hat{\rho}(\vec{r}), \hat{\varphi}(\vec{r}')] = i\delta(\vec{r}-\vec{r}') \tag{96}$$

実際、(96) より

$$\hat{\rho}(\vec{r}) = i\frac{\delta}{\delta\hat{\varphi}(\vec{r})}, \quad \hat{\varphi}(\vec{r}) = -i\frac{\delta}{\delta\hat{\rho}(\vec{r})} \tag{97}$$

が成立するので、

$$[e^{i\hat{\varphi}(\mathbf{r})}, \hat{\rho}(\mathbf{r}')] = e^{i\hat{\varphi}(\mathbf{r})}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \quad [\hat{\rho}(\mathbf{r}), e^{i\hat{\varphi}(\mathbf{r}')}] = -e^{i\hat{\varphi}(\mathbf{r}')}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{98}$$

が成立する。更に、

$$[e^{i\hat{\varphi}(\mathbf{r})}, f[\hat{\rho}(\mathbf{r}')]] \simeq [e^{i\hat{\varphi}(\mathbf{r})}, \hat{\rho}(\mathbf{r}')]f'[\hat{\rho}(\mathbf{r}')] = e^{i\hat{\varphi}(\mathbf{r})}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')f'[\hat{\rho}(\mathbf{r}')] \tag{99}$$

と近似すると[6]

$$[e^{i\hat{\varphi}(\mathbf{r})}, \sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r}')}] = e^{i\hat{\varphi}(\mathbf{r})}\frac{1}{2\sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r}')}}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \quad [\sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r})}, e^{-i\hat{\varphi}(\mathbf{r}')}] = e^{i\hat{\varphi}(\mathbf{r}')}\frac{1}{2\sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r})}}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{100}$$

が導かれる。これから

$$\begin{aligned}
[\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}')] &= \left[\sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r})}e^{i\hat{\varphi}(\mathbf{r})}, e^{-i\hat{\varphi}(\mathbf{r}')}\sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r}')}\right] \\
&= \sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r})}e^{-i\hat{\varphi}(\mathbf{r}')}\left[e^{i\hat{\varphi}(\mathbf{r})}, \sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r}')}\right] + \left[\sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r})}, e^{-i\hat{\varphi}(\mathbf{r}')}\right]\sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r}')}e^{i\hat{\varphi}(\mathbf{r})} \\
&= \sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r})}e^{-i\hat{\varphi}(\mathbf{r}')}e^{i\hat{\varphi}(\mathbf{r})}\frac{1}{2\sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r}')}}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + e^{-i\hat{\varphi}(\mathbf{r}')}\frac{1}{2\sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r}')}}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r}')}e^{i\hat{\varphi}(\mathbf{r})} \\
&= \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')
\end{aligned} \tag{101}$$

---

[6] この近似の意味を明らかにするために、次の交換関係を考えよう。

$$\left[\hat{A}, \hat{B}^n\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{B}^{n-1} + \hat{B}\left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{B}^{n-2} + \cdots + +\hat{B}^{n-1}\left[\hat{A}, \hat{B}\right] \simeq \left[\hat{A}, \hat{B}\right](\hat{B}^n)' \qquad (*)$$

右辺の最後の近似が成立するならば

$$\left[\hat{A}, f(\hat{B})\right] = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left[\hat{A}, f^{(n)}(0)\hat{B}^n\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\hat{B}^n)' = \left[\hat{A}, \hat{B}\right]f(\hat{B})'$$

となり、(99) が正当化される。(*) で行った近似は

$$\hat{B}^{n-k}\left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{B}^k = \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{B}^n + \left[\hat{B}^{n-k}, \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right]\hat{B}^k$$

で最後の 2 重交換関係を無視することと等価である。(96) からわかるように、交換関係は密度 $\hat{\rho}$ に対して密度 1 のおつりを生む。従って、高次の交換関係が無視できるためには粒子数密度が 1 に比べて十分大きいことが必要かつ十分である。この条件は、系が BEC を起こしていれば満足される。

となり (94) が再現される。

(96) の両辺を $\mathbf{r}$ と $\mathbf{r}'$ について系の体積 V にわたって積分し、位相演算子 $\hat{\varphi}$ と粒子数演算子 $\hat{N}$ を

$$\hat{\phi} \equiv \frac{1}{V}\int \hat{\varphi}(\mathbf{r})d\mathbf{r}, \quad \hat{N} \equiv \int \hat{\rho}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \tag{102}$$

のように定義すると、次の粒子数と位相の不確定性関係が導かれる。

$$\left[\hat{N}, \hat{\phi}\right] = i \tag{103}$$

これから

$$\hat{\phi} = -i\frac{\partial}{\partial \hat{N}} \tag{104}$$

が導かれる。これを使うと

$$\frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{\phi}\right] = -\frac{1}{\hbar}\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{N}} \tag{105}$$

両辺の期待値を取り、$\langle\hat{\phi}\rangle = \phi$、$\langle\hat{H}\rangle = E$ と置くと

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial N} = -\frac{1}{\hbar}\mu \tag{106}$$

ここで $\mu \equiv \partial E/\partial N$ は化学ポテンシャルである。両辺に ∇ を作用させて (88) を代入すると超流動速度の従う**オイラー方程式** (Euler equation) が得られる。

$$\frac{d}{dt}\mathbf{v}_\mathrm{s} = \frac{\partial \mathbf{v}_\mathrm{s}}{\partial t} + (\mathbf{v}_\mathrm{s}\cdot\nabla)\mathbf{v}_\mathrm{s} = -\frac{1}{m}\nabla\mu \tag{107}$$

12. 2流体模型

超流動体が壁に対して速度 $\mathbf{v}_\mathrm{s}$ で動いている準安定状態を考えよう。流れの密度 $\mathbf{j}$ は $\mathbf{v}_\mathrm{s} = 0$ の時ゼロだから、 $\mathbf{v}_\mathrm{s}$ が小さいときは次のような線形関係にあると考えられる。

$$\mathbf{j} = \int K_\mathrm{s}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\mathbf{v}_\mathrm{s}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' \tag{108}$$

ここで、K_s は線形応答理論における応答関数である。$\mathbf{v}_\mathrm{s}$ の空間変化が緩やかな場合は (108) の積分から $\mathbf{v}_\mathrm{s}$ を外へ出すことができて

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \rho_\mathrm{s}(\mathbf{r})\mathbf{v}_\mathrm{s}(\mathbf{r}), \quad \rho_\mathrm{s}(\mathbf{r}) \equiv \int K_\mathrm{s}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')d\mathbf{r}' \tag{109}$$

という局所的な関係式が導ける。超流動速度は (88) で定義される微視的な量であるが、超流動密度は (109) の定義からわかるように粗視化された流体力学的概念である。BEC は1粒子密度演算子から定義されることからもわかるように熱力学的量であるのに対して、超流動密度は線形応答理論から定義される輸送係数の一種である。

常流動体の密度 ρ_n は全粒子数密度 ρ と ρ_s との差 $\rho - \rho_\mathrm{s}$ で定義される。常流動体は超流動体からの準粒子励起の集合と解釈できる。全系が速度 $\mathbf{v}_\mathrm{s}$ で動く場合、質量流は $\rho\mathbf{v}_\mathrm{s}$

である。準粒子があるとこの部分も質量流に寄与するのでこれを $\rho_n(\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_s)$ と書こう。すると全質量流は

$$\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}_s + \rho_n(\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_s) = (\rho - \rho_n)\mathbf{v}_s + \rho_n \mathbf{v}_n = \rho_s \mathbf{v}_s + \rho_n \mathbf{v}_n \tag{110}$$

常流動体の速度 $\mathbf{v}_n$ は (110) で定義されるものと考えられる。超流動性分は渦無しのポテンシャル流 [(88)、(89)]、常流動成分は粘性流である。

全質量流に対する加速方程式は圧力を P として

$$\frac{d}{dt}\mathbf{j} = -\nabla P \tag{111}$$

で与えられる。超流動体を記述する運動方程式は、(89)、(107)、(111) で与えられる。

(111) の左辺に (110) を代入すると

$$\rho_s \dot{\mathbf{v}}_s + \rho_n \dot{\mathbf{v}}_n = -\nabla P \tag{112}$$

$\dot{\mathbf{v}}_s$ に (107) を代入すると

$$\rho_n \dot{\mathbf{v}}_n = \frac{\rho_s}{m}\nabla\mu - \nabla P \tag{113}$$

ここで、系全体が温度が T、圧力が P、全粒子数が N の熱平衡状態にある場合を考えよう。温度、圧力、粒子数を熱力学的変数とする熱力学関数はギブスの自由エネルギー $G(T,P,N)$ である。G は示量変数としては粒子数を含むだけなので

$$G(T,P,\alpha N) = \alpha G(T,P,N) \tag{114}$$

両辺を α で微分して $\alpha = 1$ とおけば

$$G = \frac{\partial G}{\partial N}N = \mu N \tag{115}$$

これを

$$dG = -SdT + VdP + \mu dN \tag{116}$$

に代入すれば次の**ギブス－デュエムの関係式** (Gibbs-Duhem relation) が得られる。

$$SdT - VdP + Nd\mu = 0 \tag{117}$$

系の温度変化がない場合 ($dT = 0$) は

$$\nabla P = \frac{N}{V}\nabla\mu = \frac{\rho}{m}\nabla\mu \tag{118}$$

となるのでこれを (113) の右辺に代入すると

$$\rho_n \dot{\mathbf{v}}_n = \frac{1}{m}(\rho_s - \rho)\nabla\mu \tag{119}$$

絶対零度で系が定常的な場合は $\dot{\mathbf{v}}_n = 0$ なので、$\rho_s = \rho$、すなわち、絶対零度では超流動体の密度は全密度に等しい。これに対して、相互作用のある系ではBECの粒子数密度は一般に全密度よりも小さくなる。

2流体モデルでは、常流体は超流動体と独立に運動できるので、フォノンやロトンは超流動体と直接にはエネルギーや運動量のやり取りをしない。しかし、フォノンやロトンは渦糸と相互作用をすることにより間接的に超流動体を減衰させる。

13. ランダウ判定基準

超流動状態の安定性の判定基準の一つに**ランダウの判定基準** (Landau criterion) がある。

超流動体中を運動する不純物を含む多粒子系を実験室系 I と不純物と同じ速度 $\mathbf{v}$ で運動する不純物の静止系 II の 2 つの座標系で考察する。

実験室系 (I) では超流動体は静止しているので超流動体のハミルトニアンと運動量は

$$\hat{H}_I = \sum_i \frac{m}{2}\mathbf{v}_i^2 + \sum_{i>j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad \hat{P}_I = \sum_i m\mathbf{v}_i \tag{120}$$

不純物の静止系 (II) では超流動体の各粒子の速度は $\mathbf{v}_i - \mathbf{v}$ なので

$$\hat{H}_{II} = \sum_i \frac{m}{2}(\mathbf{v}_i - \mathbf{v})^2 + \sum_{i>j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \hat{H}_I - \hat{P}_I\mathbf{v} + \frac{m}{2}\mathbf{v}^2 N, \quad \hat{P}_{II} = \sum_i m(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}) \tag{121}$$

まず、多粒子系が基底状態 $|\mathrm{GS}\rangle$ にあり、実験室系 (I) において全体として静止している場合を考えよう。このとき

$$\hat{H}_I|\mathrm{GS}\rangle = E_0|\mathrm{GS}\rangle, \qquad \hat{P}_I|\mathrm{GS}\rangle = 0 \tag{122}$$

$$\hat{H}_{II}|\mathrm{GS}\rangle = \left(E_0 + \tfrac{m}{2}\mathbf{v}^2 N\right)|\mathrm{GS}\rangle, \quad \hat{P}_{II}|\mathrm{GS}\rangle = -m\mathbf{v}N|\mathrm{GS}\rangle \tag{123}$$

次に、不純物により系が励起され実験室系において励起エネルギー $\epsilon_\mathbf{p}$、運動量 $\mathbf{p}$ を持った状態 $|\epsilon_\mathbf{p}, \mathbf{p}\rangle$ にあるとしよう。このとき、

$$\hat{H}_I|\epsilon_\mathbf{p}, \mathbf{p}\rangle = (E_0 + \epsilon_\mathbf{p})|\epsilon_\mathbf{p}, \mathbf{p}\rangle, \qquad \hat{P}_I|\epsilon_\mathbf{p}, \mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}|\epsilon_\mathbf{p}, \mathbf{p}\rangle \tag{124}$$

$$\hat{H}_{II}|\epsilon_\mathbf{p}, \mathbf{p}\rangle = \left(E_0 + \epsilon_\mathbf{p} - \mathbf{p}\mathbf{v} + \tfrac{m}{2}\mathbf{v}^2 N\right)|\epsilon_\mathbf{p}, \mathbf{p}\rangle, \quad \hat{P}_{II}|\epsilon_\mathbf{p}, \mathbf{p}\rangle = (\mathbf{p} - m\mathbf{v}N)|\epsilon_\mathbf{p}, \mathbf{p}\rangle \tag{125}$$

ところで、ギブスの正準集団は外部ポテンシャルの静止系（今の場合は II 系）において定義される。従って、励起前後における系のエネルギーの変化は (123) と (125) の差で与えられるので

$$\epsilon_\mathbf{p} - \mathbf{p}\mathbf{v} \ (\text{外部ポテンシャルの静止系からみた素励起のエネルギー}) \tag{126}$$

である。こうして不純物の速度が流体の位相速度 $\epsilon_\mathbf{p}/p$ を超えると $\theta = \cos^{-1}(\epsilon_\mathbf{p}/pv)$ を満足する θ 方向に運動量が $\mathbf{p}$ でエネルギーが $\epsilon_\mathbf{p}$ の励起が放出される (これはチェレンコフ放射)。こうして、不純物の運動が超流動体系を励起するために必要な最小速度は

$$v_\mathrm{c} = \min\left(\frac{\epsilon_\mathbf{p}}{p}\right) \tag{127}$$

であることがわかる。(127) をランダウの判定基準という。

14. 巨視的量子現象

磁束の量子化やジョセフソン効果など多くの巨視的量子効果は、ミクロな粒子（または、以下で述べるクーパー対のような複合粒子）の干渉効果がボース・アインシュタイン凝縮というメカニズムによりマクロなレベルに増幅された結果として起こる。ここでは、その典型例であるジョセフソン効果について述べよう。

薄い絶縁体を導体で挟んだ構造はトンネル接合と呼ばれ、古典的には電流は流れないが量子力学的なトンネル効果によって電流が流れる。トンネル効果は、左右の導体の電子の波動関数 $\phi^{\mathrm{L}}, \phi^{\mathrm{R}}$ が絶縁体中を減衰しながらも反対側の導体へしみ出した結果生じる。全系の電子の波動関数は左右の導体中の電子の波動関数をそれぞれ ϕ^{L}、ϕ^{R} と書くと近似的に

$$\Psi(\vec{r}) = a\phi^{\mathrm{L}}(\vec{r}) + b\phi^{\mathrm{R}}(\vec{r}) \tag{128}$$

と表せる。ここで a, b は、条件 $|a|^2 + |b|^2 = 1$ を満足する複素数である。絶縁体付近では $\phi^{\mathrm{L}}(\vec{r})$ と $\phi^{\mathrm{R}}(\vec{r})$ が共存し干渉するが、トンネル効果はこの干渉効果の結果であると解釈できる[7]。左右の導体が超伝導体である場合の接合をジョセフソン接合という。超伝導の本質は2個の電子がクーパー対と呼ばれるボソンの対を作って、これが同じ量子状態にボース・アインシュタイン凝縮することにある[8]。左右の電極のクーパー対の波動関数を $\chi^{\mathrm{L,R}}$ と書くとジョセフソン接合の波動関数は

$$\Psi^{\mathrm{Josephson}} = \prod_{i=1}^{N} \left(a\chi^{\mathrm{L}}(\vec{r}_i) + b\chi^{\mathrm{R}}(\vec{r}_i) \right)^N \tag{129}$$

と書ける。ここで、N はクーパー対の数、$\vec{r}_i$ はその重心の座標を示している（相対座標は本質的ではないので省略している）。ひとたび超伝導となるとすべてのクーパー対は同じふるまいをするので、ジョセフソン接合の振る舞いは波動関数 $a\chi^{\mathrm{L}} + b\chi^{\mathrm{R}}$ の振るまいを調べることで理解できる[9]。特に、電流は χ^{L} と χ^{R} の干渉効果が BEC により N 倍に増幅されるために、電極間の電圧差がゼロでも超伝導電流が流れる。これを（直流）ジョセフソン効果という。(129) から明らかのようにジョセフソン効果は本質的にはクーパー対という電子対のミクロな干渉効果が BEC によってマクロに増幅された結果生じる。

これに対して、BEC を起こした系が全体として ϕ_1 と ϕ_2 という2つの異なった状態をとり、それらの間に干渉効果が起こるという状況も考えられる。この場合に対応する波動関数は

$$\Psi = a\prod_{i=1}^{N} \phi_1(\vec{r}_i) + b\prod_{i=1}^{N} \phi_2(\vec{r}_i) \tag{130}$$

で与えられる。16.1.節で述べる猫状態はこのような状態に対応している。無論、実際の状況では生きている状態（あるいは、死んでいる状態）にある猫の原子がすべて同じ状態にボース・アインシュタイン凝縮している必要性はないので、猫状態はより一般には次のように書ける。

$$\Psi^{\mathrm{cat}} = a\Psi^{\mathrm{live}}(\mathbf{r}_1, \vec{r}_2, \cdots, \vec{r}_N) + b\Psi^{\mathrm{dead}}(\mathbf{r}_1, \vec{r}_2, \cdots, \vec{r}_N) \tag{131}$$

この状態は、量子情報の分野で「最大限もつれた状態」(maximally entangled state) と呼ばれる[10]。

---

[7] 実際、電子が一方の導体から他方の導体へとトンネルする確率振幅は、$\phi^{\mathrm{L}}(\vec{r})$ と $\phi^{\mathrm{R}}(\vec{r})$ の干渉の度合いを表す重なり積分という呼ばれる量で表される。

[8] 電子はフェルミオンであるので、そのままではBEC を起こせないことに注意しよう。クーパー対はボソンなのでBEC を起こせる。

[9] これは、次の教科書で詳しく述べられている。ファインマン、レイトン、ザンズ：「ファインマン物理学V：量子力学」（岩波書店）

[10] もっとも、多粒子系に対するもつれの度合いを定量的に表す方法はまだ確立していないので、「最大限」という言葉の意味は必ずしも明確ではない。

ここで述べた2種類の状態 (129) と (130) [あるいは (131)] は共に巨視的な量子状態と呼ばれる。違いは、前者は本質的に一体的（あるいは二体的）な効果がBECのおかげでマクロなレベルに増幅されているという状況を記述しているのに対して、後者は、多粒子系の量子状態が二つの著しく異なった状態（猫の例では「生きている」状態と「死んでいる」状態）をとりえて、しかも、それらが重ね合わせの状態にある状況を記述している。もつれの度合いに関する曖昧さと同様に、ここでも多粒子系の量子状態が「著しく異なっている」とは何を意味するのかは、一般的には、必ずしも自明ではなく興味深い研究課題である。

問題（robustness of quantum states）
BEC状態はデコヒーレンスに対して安定であり、他方、猫状態はたった一個の原子に関する情報が失われるだけで壊れることを示せ。

15. シュレーディンガーの猫のパラドックス：重ね合わせの原理の帰結

シュレーディンガーの猫のパラドックスは、状態の時間発展を記述する演算子 $\hat{U}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ が線形であることから生じる。$\hat{U}$ が線形であるとは、$\hat{U}\phi_1 = \Psi_1$、$\hat{U}\phi_2 = \Psi_2$ であれば、任意の複素数 a, b に対して、$\hat{U}(a\phi_1 + b\phi_2) = a\Psi_1 + b\Psi_2$ が成立すること意味する。いま、観測したいミクロな系とそれを測定する測定器の初期状態をそれぞれ ϕ_i, X_0 とし、$\hat{U}$ が系と測定器との時間発展を記述する演算子であるとしよう。理想的な測定とは、相互作用の後、系の状態と測定器の状態が一対一に対応するものである。すなわち、

$$\hat{U}\phi_i X_0 = \phi_i X_i \tag{132}$$

左辺は、観測前の測定器の状態はいつも同じ状態 X_0 にリセットされていることを表している。右辺は、測定後の測定器の状態が系の状態 ϕ_i に対応した状態 X_i となることを表している。このような理想測定を仮定すると、測定前の系の状態が重ね合わせの状態 $\sum_i c_i\phi_i$ にある場合は、$\hat{U}$ の線形性より測定後の状態は

$$\hat{U}\left(\sum_i c_i\phi_i\right) X_0 = \sum_i c_i\phi_i X_i \tag{133}$$

となる。右辺は、巨視的な測定器の状態 X_i が重ね合わせの状態にあることを示している。

このように量子力学的時間発展の線形性をマクロな世界に外挿すれば、日常経験[11] からはありえないと思われる巨視的状態の重ね合わせの状態が導かれることが避け得ないということがシュレーディンガーの猫のパラドックスの本質である。

このようなパラドックスが生じたのは線形性を要請したからであり、それが破れているのではないかという反論も考えられる。しかし、時間発展の線形性が破れると、量子状態を複製（クローン）することが可能になり、それを使って不確定性原理や光速度不変の原理を破ることができる[12]。従って、これらの原理が互いに無矛盾である限り巨視的状態の重ね合わせは避けえないと思われる。時間発展の線形性、不確定性原理、そして光速

[11] 素朴な日常経験からは、巨視的に区別できる状態（例えば猫が生きている状態と死んでいる状態）の重ね合わせの状態 —シュレーディンガーの猫状態— は不可能であると考えられる。このような立場を、**巨視的実在論** (macrorealism) という。

[12] W. K. Wootters and W. H. Zurek, Nature **299**, 802 (1982); D. Dieks, Phys. Lett. A **92**, 271 (1982). これと相補的な定理として、最近、未知の量子状態を消去することができないことが示された。A. K. Pati and S. L. Braunstein, Nature **404**, 164 (2000).

度不変の原理という物理の基本原理が互いに独立ではなく、一つが破れると残りもだめになってしまうという事実は一体何を意味しているのだろうか。私には、背後にもっと基本的な原理が隠れているように思われる。

問題　量子状態の時間発展の線形性を仮定すると、未知の状態を複製（クローン）することが不可能であることを示せ。

16. デコヒーレンス

それでは、日常の世界で巨視的状態の重ねあわせが見られないのはなぜかという疑問が湧く（ただし、16.1. で述べるように実験室では最近そのような状態が作られた。）。これに対する有力な答えは、巨視的な系はそれを取り巻く「環境」と強い相互作用を行い、その結果、重ね合わせの状態が壊れてしまうというものである。これをデコヒーレンス (decoherence) という。デコヒーレンスのメカニズムは個々の系の具体的な性質に強く依存するために一概に論じることはできない。しかし、量子計算を行う上では、重ね合わせの状態を長く続かせることが重要で、そのため、デコヒーレンスの原因を解明しそれを回避あるいは除去しようとする研究が現在のホットなトピックスとなっている。

16.1. 巨視的量子コヒーレンス

最近になって、超伝導量子干渉デバイス (Superconducting Quantum Interference Device —SQUID) という素子を使って、巨視的量子状態の重ね合わせの状態を作ることに２つのグループが成功した[13]。SQUID はジョセフソン接合を含む超伝導のリングであり、リングを貫く磁束が磁束量子 $\Phi_0 = h/2e$ の半分の時には、超伝導電流がリングの一方向に回る状態 Ψ_1 と反対方向に回る状態 Ψ_2 がエネルギー的に縮退する。Ψ_1 と Ψ_2 では、巨視的な数のクーパー対が反対方向に回っており、これらの状態は SQUID を貫く磁束を観測することにより巨視的に区別できる。これら巨視的状態の重ね合わせの状態は、状態 (130) に対応しており、それが実現できればシュレーディンガーの猫状態を発生したものといえる。

もし、これらの状態を重ね合わせることができれば、新しい固有状態は

$$\Psi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 \pm \Psi_2) \tag{134}$$

となり、Ψ_+ に対応するエネルギー E_+ は Ψ_- に対応するエネルギー E_- よりも低くなる。すなわち、エネルギーの縮退は解ける。そこで、エネルギーの差 $E_- - E_+$ に相当する電磁波を照射すると共鳴的な吸収が観測されるものと予測される。フリードマンらとヴァールらは実際にそのような信号をとらえることに成功した。

巨視的な量子状態の重ね合わせは巨視的量子コヒーレンスとよばれ、1980年代初頭から捜し求められてきたが、20年の努力の末についに観測された。今後は、これらやボース・アインシュタイン凝縮の実験に刺激されて巨視的量子現象の研究が進展し、その過程で思いもよらなかった新しい現象が発見されるかもしれない。

[13] Jonathan R. Friedman, Vijay Patel, W. Chen, S. K. Tolpygo, J. E. Lukens, Nature **406**, 43 (2000); Caspar H. van der Wal, A. C. J. ter Haar, F. K. Wilhelm, R. N. Schouten, C. J. P. M. Harmans, T. P. Orlando, Seth Lloyd, and J. E. Mooij, Science **290**, 773 (2000)

16.2. レゲットーガーグの不等式

量子力学では観測するまでは実在というものを考えてはならず、確率振幅という情報のみが存在する。これは、物理量が測定するまでは確定値を持っていないということを意味している（物理量が測定によって確定値を持つことは可能である）。これに対して、日常世界では、巨視的物体の観測量は、我々が観測する、しないに関わらず各瞬間ごとに決まった値を持っていると多くの人は信じていようこれを**巨視的実在論** (macrorealism) という。

ミクロな世界は量子力学に従っているにもかかわらず、巨視的物体の状態が重ね合わせの状態にあることを見た人は誰もいない。このような我々のとって確かだと思われる日常の経験事実は、原子の世界を記述する力学として誕生した量子力学が、果たしてどこまで巨視的な領域へ外挿できるのかという根本的な疑問をいだかせる。

残念ながら、このような根本的な疑問は多くの場合、明快な答えを持たない。その理由は、答えを見出せないというよりもむしろ、もっともらしい「答え」がありすぎでどれが真相かの見極めがつかないからである。その代表例が環境との相互作用によるデコヒーレンスである。これによると、巨視系は必然的に環境と相互作用せざるを得ず、その結果、重ね合わせの状態がミクロな時間スケールで壊れてしまうというものである。

おそらく、より真相をついている答えは、巨視的物体は実際に量子力学的な重ね合わせの状態にあり得るが、それを観測するために適したオブザーバブルを我々は持たないということであろう。具体的に、N 粒子系の互いに直交する状態 $\Psi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N)$ $(i = 1, 2)$ を考えよう。これらの状態の干渉効果を観測するためには、あるオブザーバブル $\hat{O}$ が存在して、それに対する行列要素が有限でなければならない。

$$\int \Psi_1^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N)\hat{O}\Psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N)d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \cdots d\mathbf{r}_N \neq 0 \tag{135}$$

ところが、相互作用をしている多粒子形では、N 粒子全体がもつれた状態 (entangled state) にあるためにそのようなオブザーバブルを構成することは至難である。

おそらく最も厄介な疑問は、そのような干渉効果が観測されたとして、それが量子力学によって記述されるだけではなく、巨視的実在論によっても記述されるのではないかというものである。そこで、ある現象が後者ではなく前者によってのみ説明可能であることの基準はなにかという問題が生じる。それに対する一つの答えが**レゲットーガーグの不等式** (Leggett–Garg inequality) である[14] 。この不等式は次に挙げる三つの前提の上に成立する。

- 巨視的実在論 (macrorealism) : 巨視系が、巨視的に区別できる2個以上の状態をとりうる場合、観測するしないにかかわらず系は各瞬間ごとにどれか1つの状態にある。
- 帰納性 (induction) : ある時刻におけるアンサンブルの性質は、その時刻以前の条件には依存するがその時刻における測定には依らない。この仮定が成立すると、観測結果が被測定系の性質そのものであるとみなすことが可能になる。
- 非破壊測定が可能であること (noninvasive measurability) : これは次のことを意味している。時刻 $t = 0$ で系が状態 $A(B)$ に見出される確率を $p_A(p_B)$ とする。そして、時刻 $t > 0$ で2回目の測定を行った場合に系が状態 C に見出される条件付確率を $P(C|A)$ $(P(C|B))$ と書こう。他方、時刻 $t = 0$ で測定を行わなかった場合に、時刻 t で系が状態 C に見出される確率 $P(C)$ は次のように与えられる。$P(C) = P(C|A)p_A + P(C|B)p_B$ すなわち、測定行為は統計性に影響を与えない。

[14] A. J. Leggett and A. Garg, Phys. Rev. Lett. **54**, 857 (1985)

議論を簡単にするため、巨視的物体がとりうる状態が2つしかなく、これらに対応して観測量 Q のとりうる値が $+1$ または -1 であるとしよう。時刻 $t_1 < t_2 < t_3 < t_4$ において Q を観測した測定値を Q_1, Q_2, Q_3, Q_4 とし、これらの値が得られる確率密度を $\rho(Q_1, Q_2, Q_3, Q_4)$ としよう。このとき、時刻 t_1、t_2 における測定値の相関関数は次のように定義される。

$$K_{12} = \langle Q_1 Q_2 \rangle \equiv \sum_{Q_1,Q_2,Q_3,Q_4=\pm1} Q_1 Q_2 \rho(Q_1, Q_2, Q_3, Q_4) \tag{136}$$

他の相関関数 $K_{13}, K_{14}, K_{23}, K_{24}$ も同様に定義される。このとき、次の不等式が成立する。

$$1 + K_{12} + K_{23} + K_{13} \geq 0 \tag{137}$$
$$|K_{12} + K_{23} + K_{34} - K_{14}| \leq 2 \tag{138}$$

これらをレゲットーガーグの不等式という。

証明は次のようにしてなされる。$Q_i^2 = 1$ に着目すると

$$|Q_1Q_3 + Q_2Q_3| = |(Q_1Q_3 + Q_2Q_3)Q_2Q_3| = Q_1Q_2 + 1$$

よって、

$$-(Q_1Q_3 + Q_2Q_3) \leq Q_1Q_2 + 1$$

両辺に $\rho(Q_1, Q_2, Q_3, Q_4)$ を掛けて平均すれば (137) が得られる。同様にして、

$$|Q_1Q_2 + Q_2Q_3| = |(Q_1Q_2 + Q_2Q_3)Q_2Q_3| = |Q_1Q_3 + 1| = 1 + Q_1Q_3$$
$$|Q_1Q_4 - Q_3Q_4| = |(Q_1Q_4 - Q_3Q_4)Q_3Q_4| = |Q_1Q_3 - 1| = 1 - Q_1Q_3$$

よって

$$|Q_1Q_2 + Q_2Q_3 - (Q_1Q_4 - Q_3Q_4)| \leq 2$$

両辺に $\rho(Q_1, Q_2, Q_3, Q_4)$ を掛けて平均すれば (138) が得られる。

さて、系が2つの状態を取り、それらの間をコヒーレントにラビ振動する場合を考えよう。このとき、相関関数は

$$K_{ij} = \cos\Omega(t_i - t_j) \tag{139}$$

で与えられる。時間間隔を $t_{i+1} - t_i = 3\pi/(4\Omega)$ と選べば (137) の左辺は $1 - \sqrt{2}$ となり不等式は破れる。また、$t_{i+1} - t_i = \pi/(4\Omega)$ と選べば (137) の左辺は $2\sqrt{2}$ となりやはり不等式は破れる。

超伝導リングを用いてこのことが実現できるという提案がテシェによりなされている[15]。

17. 引力相互作用するBEC

17.1. 準安定なBEC

BECが実空間で起こるのか、運動量空間で起こるのか、あるいは両者の中間領域で起こるのかは、相互作用の性質と境界条件による。斥力相互作用は密度揺らぎを抑圧するの

[15] C. D. Tesche, Phys. Rev. Lett. **64**, 2358 (1990)

で、空間的に一様な系ではBECは運動量空間で起こる。他方、引力相互作用は密度の高い領域を作ろうとするので、一様な系ではBECは起こらないと信じられている。

^{7}Li は、S波散乱長が負であり、実効的には引力相互作用をする。引力相互作用をする一様なボーズ粒子系は気体相では安定には存在し得ず、高密度な液体相または固体相へと転移し、BECは起こらないと信じられている。ところがライス大学のグループは磁気ポテンシャルに閉じ込められた ^{7}Li の原子気体が準安定なBECを形成することを実験的に見出した [6]。準安定なBECが存在できる理由は定性的には次のように理解できる。

R 程度の領域に閉じ込められた原子のポテンシャルエネルギーは R^2 に比例し、運動エネルギーは不確定性関係により $1/R^2$ に比例する。引力相互作用のエネルギーは負で、原子数密度 N/R^3 に比例する。ここで、N は全原子数である。全エネルギーはこれら三つの項の和で与えられるので、全原子数 N がある臨界値 N_c よりも小さければ、全エネルギーは極小点を持つ。

極小点と真の基底状態（金属）$R \sim 0$ を隔てるポテンシャル障壁の物理的起源は（ゼロ点）運動エネルギー $\propto 1/R^2$ なので、準安定なBECが存在できる条件が、零点エネルギー $\sim \hbar\omega$ が一粒子あたりの（平均場）引力相互作用エネルギーの大きさ $N|U_0|/R^3$ よりも大きいことであることが理解できる。比例定数 U_0 はS波散乱長 a をもちいて、$U_0 = 4\pi\hbar^2 a/M$ と書けるので（U_0 は、換算質量が $M/2$ のボルン散乱振幅である）、この条件から準安定なBECが存在できるためには、BECの原子数に上限

$$N_c \sim \frac{d_0}{|a|}$$

が存在することが分かる。ここで、$d_0 \equiv (\hbar/M\omega)^{\frac{1}{2}}$ は、先に述べた調和振動子の基底状態の波動関数の大きさである。BECの原子数が N_c になると、準安定な状態と真の基底状態である高密度相 $R \sim 0$ とを隔てるエネルギー障壁は消え、BECは崩壊する。理論的に予言されている N_c の値は、ライス大学の実験系の場合は１２００程度であり、実験結果 [6] も同程度の値を示している。

17.2. BECの崩壊

引力相互作用をする系の崩壊は、古典系でもみられる。この場合、崩壊の条件は、1粒子あたりの相互作用エネルギーが $k_B T$ を超えることである。BEC崩壊の問題は、引力相互作用を重力ポテンシャルに置き換えると重力場におけるいわゆるジーンズ不安定性と類似の問題になる。

$N < N_c$ の場合にはBECは形成されるが、BEC状態は真の基底状態ではないのでやがては崩壊する。BECが崩壊するメカニズムは主として3種類が考えられる。

第一の可能性は、原子が衝突の際にスピン反転を起こしてトラップから放逐されたり、3体衝突を起こして束縛状態を形成し、その際に放出される潜熱によってトラップから飛び出す非弾性散乱の過程である。

第二の可能性は、BECが分裂して崩壊するメカニズムである。原子間相互作用が引力の場合は、空間的に一様な系では、BECが単一の量子状態にある場合よりも複数の量子状態にある場合の方が交換相互作用の分だけ得をする。したがって、BECは複数の量子状態へと分裂していき、ついには巨視的な原子数に占有された状態が消滅してしまうというシナリオである。角周波数が ω の等方的な放物型ポテンシャルにトラップされているBECが、このメカニズムにより崩壊するための条件を考えよう。原子数密度を n とすれば、BEC状態にある一原子あたりのハートリーエネルギーとフォックエネルギーは共に nU_0 であるので、BECから原子一つが励起されるとフォックエネルギーの分だけ相互作用エネルギーは得をする。しかし、励起状態は、少なくとも $\hbar\omega$ だけ高いエネルギー状

態にあるので、原子一つが励起されることによるエネルギーの変化分は $\hbar\omega - n|U_0|$ となる。従って、BEC が分裂して崩壊するための条件は、$\hbar\omega < n|U_0|$ である。ライス大学の実験では $\hbar\omega$ ~7nK、$n|U_0|$ ~1nK なので、BEC はこのメカニズムでは崩壊しないと考えられる。

第三の可能性は、準安定な BEC 相が巨視的な量子トンネリングを起こして高密度相へと崩壊するというシナリオである [7]。次にこの可能性について議論しよう。

17.3. 巨視的量子トンネリング

準安定状態にある系の零点振動は、等方的な膨張と収縮を繰り返すモード（breathing mode）である。これは、系がエネルギーの極小点の周りで振動するフォノンモードである。しかし、引力相互作用をする原子集団の長波長モードは不安定で、ひとたび大きな揺らぎが起こると全体がいっきに崩壊してしまう可能性がある。このような崩壊は、原子数が大きいためにトンネリングを介しては起こらないという主張がしばしば行なわれている。我々は、このトンネルレートをインスタントン法を使って定量的に評価した [7]。その結果、トンネルレートは、N が N_c に近づくにつれ急速に増大することを見出した。例えば、N が N_c の 99 % では、トンネルレートは一秒あたり 10^{-4} 回 という小さい値になり、この領域では、非弾性散乱による BEC の崩壊が支配的になる。しかし、N がそれよりもほんの少し増大し、N_c の 99.5 %になると、１秒間に２回もトンネルするようになり、巨視的量子トンネリングによる崩壊が支配的になることが予想される。

蒸発冷却が完了した直後には、磁気トラップには１０万個以上の原子がロードされているが、BEC になりうるのはこのうちたった１０００個程度なので、ほとんどの原子は非凝縮相にあると考えられる。従って、巨視的なトンネリングによって BEC が消滅しても、非凝縮相からの補給を受けて BEC が再生されるもとと考えらる。従って、BEC の原子数が時間的に成長と崩壊を繰り返すという興味深い現象が期待できる [8]。

引力相互作用をする BEC は、このほかにも斥力相互作用をする BEC には見られないユニークな特長がいくつもある。例えば、斥力相互作用の BEC が角運動量をもつと量子渦が発生するが、引力相互作用の BEC の場合は、全角運動量が重心運動に食われてしまい量子渦にならない。これは、引力相互作用のためにすべての粒子がかたまって量子化軸の周りを回ったほうがエネルギー的に得になるからである。また、循環の量子化も部分的にしか起こらないことが最近明らかになった [9]。これは、引力相互作用をする系では、複数の BEC が共存する領域が存在するからである。

17.4. ボースノヴァ：超新星大爆発のシミュレーション

準安定な BEC は気体相にあり、数ミクロンの大きさを持っている。しかし、ひとたび崩壊しはじめると、原子集団は数Å のオーダーの反発芯が見えるまで収縮していくものと予想される。従って、原子集団は一瞬のうちに、密度にして 10^{18} も圧縮されることになる。それでは、BEC は崩壊して高密度な金属になるかといえば、そうはならない。その理由は、崩壊の過程で原子密度が高くなると 3 体衝突が起こりはじめ、束縛状態の形成にともなって、数ケルビンという（BEC の温度～数 μK に比べて）莫大な潜熱が放出されるからである。放出された潜熱は原子の運動エネルギーに転化され、原子集団は大爆発を起こして飛び散ってしまうと考えられる。このような巨大な密度変化は超新星の大爆発にも匹敵するものであり、そのダイナミックスの研究は今日ボースノヴァと呼ばれる興味深い研究に発展した [10]。

18. おわりに

以上、1体の量子力学から初めて、ボース・アインシュタイン凝縮の基礎について概略の説明を行った。原子気体のボース・アインシュタイン凝縮はその実現から10年以上が経過しているが、いまだに相次いで新しい発見がなされている。当然のことながら、さまざまなバックグランドを持った研究者が次々と参入してきており、彼らのもたらすそれぞれの分野独自の考え方が融合発展して、新しいアイデアを生むという好循環が生まれている。また、ここでは述べなかったが、量子情報への応用を考える上でも、冷却原子は理想的な量子ビットを提供しており、この方面の発展も著しい。日本からも意欲を持った若い人々がこの分野に参入することを期待したい。

参考文献

[1] 上田正仁: 日本物理学会誌, **53** (1998) 663; パリティ, **14**, No. 9 (1999); 久我隆弘: 日本物理学会誌 **55** (2000) 90.

[2] O. Penrose and L. Onsager, Phys. Rev. **104**, 576 (1956)

[3] N と同程度の固有値が複数存在する場合は、BECは分裂した擬凝縮体 (fragmented psuedocondensate) にあるといわれる。この問題やレーザー冷却されたBECについては、たとえば、上田正仁、日本物理学会誌 **53**, pp. 663-672 (1998); ボース・アインシュタイン凝縮やレーザー冷却技術：
パリティ特集号「打ち寄せる原子のさざなみ」（丸善、1999年9月号）を参照されたい。

[4] I. Bloch, T. W. Hänsch, and T. Esslinger, Nature **403**, 166 (2000)

[5] C. N. Yang, Rev. Mod. Phys. **34**, 694 (1962)

[6] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 1687; C. C. Bradley, C. A. Sackett, and R. G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **78** (1997) 985.

[7] M. Ueda and A. Leggett, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 1576.

[8] C. Sackett, C. C. Bradley, M. Welling, R. G. Hulet, Appl. Phys. B **65** (1997) 433; C. Sackett, H. T. C. Stoof, R. G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 2031.

[9] M. Ueda and A. J. Leggett, Phys. Rev. Lett. vol. 83, pp. 1489-1493 (1999).

[10] 斎藤弘樹、上田正仁、固体物理 vol. 36, p. 1 (2001)